HAL
open science

Approche multi-échelles pour une prédiction fiable de la ductilité des matériaux métalliques

Holanyo Koffi Akpama

To cite this version:

Holanyo Koffi Akpama. Approche multi-échelles pour une prédiction fiable de la ductilité des matériaux métalliques. Mécanique des matériaux [physics.class-ph]. Ecole nationale supérieure d'arts et métiers - ENSAM, 2017. Français. NNT : 2017ENAM0025 . tel-01702677

HAL Id: tel-01702677

https://pastel.hal.science/tel-01702677

Submitted on 7 Feb 2018

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.

2017-ENAM-0025

École doctorale n° 432 : Science des Métiers de l'ingénieur

Doctorat ParisTech

T H È S E

pour obtenir le grade de docteur délivré par

l'École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers

Spécialité " Mécanique - matériaux "

présentée et soutenue publiquement par

Holanyo Koffi AKPAMA

le 28 août 2017

Approche multi-échelles pour une prédiction fiable de la ductilité des matériaux métalliques

Directeur de thèse : **Farid ABED-MERAIM**
Co-encadrement de la thèse : **Mohamed BEN BETTAIEB**

Jury

Mme. Anne-Marie HABRAKEN, Directrice de Recherches FNRS, MS^{2}F, Université de Liège	Président
M. Laurent DELANNAY, Professeur, IMMC, Université Catholique de Louvain	Rapporteur
M. Philippe PILVIN, Professeur, IRDL, Université de Bretagne-Sud	Rapporteur
M. Yao KOUTSAWA, Docteur (HDR), MRT, Luxembourg Institute of Science and Technology	Examinateur
M. Farid ABED-MERAIM, Professeur, LEM3, Arts et Métiers ParisTech	Examinateur
M. Mohamed BEN BETTAIEB, Maître de Conférences, LEM3, Arts et Métiers ParisTech	Examinateur

T H È S E

Arts et Métiers ParisTech - Campus de Metz
Laboratoire d'Étude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux (LEM3)
UMR CNRS 7239

Dédicace

À ma Mère bien-aimée

Remerciements

Ce travail est l'aboutissement de quatre années de recherches effectuées au sein du campus de Metz de l'école des Arts et Métiers ParisTech, et du Laboratoire d'Étude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux (LEM3). Ces quatre années, bien qu'éprouvantes ont forgé mon esprit critique et une partie de ma personnalité. À ce titre, je tiens à remercier certaines personnes qui ont contribué, de près ou de loin, au succès de cette thèse. Mes remerciements vont en premier lieu aux membres du jury pour avoir accepter d'examiner ce travail malgré leurs agendas assez chargés. Je pense spécialement aux rapporteurs qui ont évalué avec minutie ce manuscrit et ont fait des recommandations intéressantes. Je regrette de n'avoir eu accès à leurs rapports que quatre jours avant ma soutenance. En effet, j'aurais aimé disposer de plus de temps pour répondre avec satisfaction à leurs différentes questions.

Je remercie le professeur Farid ABED-MERAIM pour m'avoir fait l'honneur d'être son doctorant. Merci à lui pour les échanges scientifiques forts instructifs que nous avons eus. Je le remercie également pour son sens du détail et les interminables heures qu'il a consacré à la lecture et correction des articles ainsi que du manuscrit de thèse. Je tiens ici à lui témoigner toute ma gratitude.

Un grand merci à Hocine CHALAL tout d'abord pour ses qualités humaines. C'est le genre de personne prête à aider sans rien en attendre en retour. Je le remercie pour ses mots quand j'avais l'impression d'être au fond du gouffre. Il fait incontestablement partie de ceux qui m'ont aidé à aller jusqu'au bout de cette thèse. Je le remercie également pour m'avoir fait bénéficier de son expertise sur les éléments finis. Il est le co-encadrant idéal que j'aurais aimé avoir pour ma thèse. Merci également à Jean-Sébastien LECOMTE pour son assistance sur le tracé de figures de pole.

Toute ma gratitude au docteur Yao KOUTSAWA pour son soutient moral dans la dernière ligne droite de ma thèse.

Pour finir, j'aimerais remercier mes amis avec lesquels j'ai passé des moments agréables durant cette thèse. Je remercie spécialement Honoré LAGAZA pour ses services lors de ma soutenance. Un grand merci également à Kekeli KPOGAN qui m'a agréablement surpris en prenant ses congés pour venir assister à ma soutenance. Merci encore frangin. Je n'oublie pas mes collègues docteurs et doctorants, en l'occurrence Peng Wang, Haitao TIAN, Francis ADZIMA, Clément NONY-DAVADIE, Pascal POMAREDE, Francis PRAUD, Kevin BONNAY. Merci également à Abderrahim NACHIT pour sa bonne humeur constante qui a parfois égayé mes journées.

Table des matières

Introduction générale……6

1. Intégration numérique de la loi de comportement d'un monocristal en grandes déformations élastoplastiques……12

1.1 Introduction……12

1.2 Description du comportement élastoplastique du monocristal en grandes déformations……15

1.2.1 Décomposition de la transformation élastoplastique……..……..15

1.2.2 Cinématique discrète du monocristal……..……..17

1.2.3 Lois d'écoulement et calcul des vitesses de glissement……19

1.2.4 Module tangent microscopique……26

1.3 Intégration numérique des équations constitutives du monocristal……28

1.3.1 Critère classique de Schmid……..……31

1.3.2 Forme régularisée du critère de Schmid……...40

1.3.3 Module tangent cohérent relatif à l'algorithme évolutif appliqué au critère classique de Schmid……..46

1.4 Influence de la distorsion du réseau cristallographique sur le comportement plastique……..48

1.5 Résultats numériques et discussions……...52

1.5.1 Comparaison des algorithmes relatifs au critère classique de Schmid……..54

1.5.2 Comparaison entre la forme classique et la forme régularisée du critère de Schmid…….67

1.6 Conclusions……79

2. Intégration numérique de la loi de comportement du polycristal en grandes déformations élastoplastiques ……80

2.1 Introduction……80

2.2 Relations constitutives du polycristal……83

2.2.1 Détermination de la relation de localisation……84

2.2.2 Calcul du module tangent macroscopique……88

2.2.3 Calcul du tenseur d'interaction……90

2.3 Intégration numérique des relations constitutives du polycristal……94

2.3.1 Détermination du module tangent macroscopique par la méthode itérative de Newton–Raphson……94

2.3.2 Algorithme d'intégration du polycristal……...99

2.4 Résultats numériques……... 103

2.4.1 Paramètres microstructuraux……. 103

2.4.2 Validation qualitative du modèle autocohérent……..105

2.4.3 Sensibilité au modèle d'élasticité……...115

2.4.4 Sensibilité à l'écrouissage anisotrope……119
2.4.5 Sensibilité à la texture cristallographique initiale……...126
2.4.6 Sensibilité à la texture morphologique initiale……...134
2.4.7 Sensibilité à la structure cristallographique……136
2.4.8 Sensibilité à la loi d'écoulement à l'échelle microscopique……...139
2.4.9 Performance de la méthode itérative de Newton–Raphson……142
2.4.10 Application des modèles multi-échelles au calcul de structure……...146
2.4.11 Influence du module tangent cohérent……153
2.4.12 Validation expérimentale du modèle multi-échelle……155
2.5 Conclusions……..158
3. Prédiction de la striction localisée dans les matériaux polycristallins élastoplastiques .....……160
3.1 Introduction……..160
3.2 Formulations des critères de localisation de la déformation……....166
3.2.1 État de contraintes planes et relations constitutives bidimensionnelles……..166
3.2.2 Critère de bifurcation……168
3.2.3 Critère d'imperfection initiale géométrique……...169
3.2.4 Forme différentielle des équations d'équilibre……...172
3.3 Intégration numérique…….....173
3.3.1 Adaptation du problème mécanique à l'état de contraintes planes……..173
3.3.2 Approche par bifurcation……...174
3.3.3 Approche par imperfection initiale……176
3.3.4 Calcul de $\mathbf{G}^{PS\,B}$, G_{33}^{B} et $\mathbf{L}^{B}$ ……..177
3.4 Analyse de la localisation de la déformation de bicouches métal/élastomère……..183
3.4.1 Approche par bifurcation……...184
3.4.2 Approche par imperfection initiale……185
3.5 Résultats numériques et discussions……186
3.5.1 Prédiction de la striction localisée dans les tôles métalliques……186
3.5.2 Prédiction de la striction localisée des bicouches……...211
3.5.3 Prediction des instabilités plastiques dans les tôles soumises à des procédés de mise en forme……...215
3.6 Conclusions……..223
Conclusions et perspectives……...225
Annexe A……231
Annexe B……237
Références bibliographiques……241

Notations générales

Conventions générales

- Dans ce manuscrit, les variables vectorielles et tensorielles se distingueront des variables scalaires par leurs notations en gras.
- Sauf mention contraire, la convention de sommation d'Einstein sera utilisée dans toutes les opérations vectorielles et tensorielles effectuées. Les indices muets sont ainsi placés à droite des équations.
- Les variables décrivant le comportement du matériau à l'échelle microscopique seront représentées par des lettres minuscules, tandis que celles relatives à l'échelle macroscopique seront notées par des lettres majuscules.

Opérateurs liés aux variables tensorielles et vectorielles

$\dot{\bullet}$	dérivée temporelle de la variable $\bullet$
$\bullet^{\nabla}$	dérivée co-rotationnelle du tenseur d'ordre 2 $\bullet$
$\bullet^{-1}$	inverse du tenseur $\bullet$
$\bullet . \bullet$	produit contracté de deux variables
$\bullet : \bullet$	produit doublement contracté de deux tenseurs
$\bullet \otimes \bullet$	produit tensoriel de deux variables
$\bullet^{T}$	transposée de la variable $\bullet$
$\mathrm{Tr}(\bullet)$	trace du tenseur d'ordre 2 $\bullet$
$\lVert \bullet \rVert_{L_2}$	norme euclidienne de la variable $\bullet$

- Si $\bullet$ est un vecteur, $\lVert \bullet \rVert_{L_2} = \sqrt{\sum_{i=1}^{3} (\bullet_i)^2}$
- Si $\bullet$ est un tenseur d'ordre 2, $\lVert \bullet \rVert_{L_2} = \sqrt{\sum_{i,j=1}^{3} (\bullet_{ij})^2}$
- Si $\bullet$ est un tenseur d'ordre 4, $\lVert \bullet \rVert_{L_2} = \sqrt{\sum_{i,j,k,l=1}^{3} (\bullet_{ijkl})^2}$

Exposants utilisés

$\bullet^{e}$	partie élastique de la variable $\bullet$
$\bullet^{p}$	partie plastique de la variable $\bullet$
$\bullet^{*}$	expression de la variable $\bullet$ dans le repère attaché au réseau cristallographique
$\bullet^{0}$	expression de la variable $\bullet$ dans le milieu homogène de référence (modèle autocohérent)

Variables mécaniques principales à l'échelle du monocristal

$\mathbf{f}$	gradient de transformation
$\mathbf{g}$	gradient de vitesse
$\mathbf{d}$	taux de déformation (partie symétrique de $\mathbf{g}$)
$\mathbf{w}$	taux de rotation (partie antisymétrique de $\mathbf{g}$)
$\boldsymbol{\sigma}$	contrainte de Cauchy
$\boldsymbol{\varepsilon}$	déformation logarithmique
$\mathbf{C}$	matrice d'élasticité
$\mathbf{h}$	matrice d'écrouissage
$\mathbf{r}$	matrice de rotation du réseau cristallographique
$\mathbf{r}_G$	matrice d'orientation du repère des déformations principales du grain
$\mathbf{M}^{\alpha}$	tenseur d'orientation de Schmid du système de glissement α
$\mathbf{R}^{\alpha}$	partie symétrique de $\mathbf{M}^{\alpha}$
$\mathbf{S}^{\alpha}$	partie antisymétrique de $\mathbf{M}^{\alpha}$
$\mathbf{n}$	contrainte nominale
$\mathbf{l}$	module tangent reliant le taux de contrainte nominale au gradient de vitesse ($\dot{\mathbf{n}} = \mathbf{l} : \mathbf{g}$)

Variables mécaniques principales à l'échelle du polycristal

$\mathbf{F}$	gradient de transformation
$\mathbf{G}$	gradient de vitesse
$\boldsymbol{\Sigma}$	contrainte de Cauchy

E déformation logarithmique

N contrainte nominale

L module tangent défini par la relation suivante : $\dot{\mathbf{N}} = \mathbf{L} : \mathbf{G}$

A tenseur de concentration du gradient de vitesse

B tenseur de concentration du taux de contrainte nominale

T tenseur d'interaction de Hill

Autres variables tensorielles

$\mathbf{I}_2$ tenseur identité d'ordre 2

$\mathbf{I}_4$ tenseur identité d'ordre 4

Introduction générale

Contexte de la thèse

Ce travail de recherche a été réalisé au sein de l'équipe **Mé**canique **Nu**mérique (MeNu) du **L**aboratoire d'**É**tude des **M**icrostructures et de **M**écanique des **M**atériaux (LEM3) à Metz. L'objectif essentiel de cette thèse est de développer un outil numérique fiable et robuste permettant de prédire les limites de formabilité des tôles métalliques.

Motivation et cadre général de l'étude

Les matériaux métalliques représentent une part importante de la matière première utilisée pour la fabrication de diverses pièces et produits finis, notamment dans les secteurs industriels et technologiques (automobile, ferroviaire, aéronautique, électroménager, électronique…). Ces matériaux utilisés se présentent sous la forme de structures massives ou de produits plats (tôles). Dans cette thèse, nous limiterons notre attention à l'étude des tôles métalliques minces. Les défis climatiques actuels (protocole de Kyoto, COP21…) et l'augmentation des prix de matières premières imposent aux producteurs et transformateurs de tôles métalliques (sidérurgistes, industrie automobile…) une amélioration des méthodes de production et d'industrialisation afin de satisfaire aux nouvelles normes environnementales tout en relevant les nouveaux défis de compétitivité. À ce titre, une des innovations importantes consiste à alléger considérablement les pièces métalliques et les produits finis sans remettre en cause leurs résistances. Réduire la masse d'un véhicule de 25 %, par exemple, entraine une diminution de sa consommation en carburant de 15 %. Cet allègement des structures nécessite cependant une conception de pointe de nouveaux matériaux métalliques dotés de propriétés physiques et mécaniques optimales (faible densité massique, haute résistance mécanique, ductilité élevée, haute résistance à la corrosion…). De nouvelles générations de matériaux métalliques, tels que les aciers à très haute résistance (THR), les alliages de titane et les nouveaux alliages d'aluminium ont vu le jour dans ce cadre. Par ailleurs, le développement de ces nouveaux matériaux métalliques nécessite bien souvent une compréhension approfondie des mécanismes physiques mis en jeux lors des opérations de formage par déformation plastique. En effet, l'application de procédés de mise en forme, tel que l'emboutissage, peut entraîner l'apparition de défauts (liés à des instabilités plastiques) sur les pièces formées, ce qui peut conduire des séries entières de pièces au rebut et nécessiter de coûteuses modifications des processus d'industrialisation (traitement thermomécanique, outillage...). Ces instabilités peuvent être classées en deux grandes familles : les instabilités de type structure (flambement, plissement, retour élastique…) et les instabilités de type matériau (striction diffuse et

localisée, endommagement…). Dans ce travail, nous nous intéresserons au deuxième type d'instabilités, et plus particulièrement à la striction localisée. Cette forme localisée de striction se traduit par une concentration très forte de la déformation plastique dans une zone très étroite de la pièce, et est quelques fois précédée d'une striction diffuse qui s'amplifie de plus en plus jusqu'à précipiter la localisation de la déformation. L'apparition d'une striction localisée représente l'état ultime de déformation admissible sur une pièce, puisque ce phénomène est souvent précurseur de ruine. La ductilité (ou formabilité) d'un matériau se mesure par sa capacité à subir des déformations irréversibles sans laisser apparaître de striction localisée. Pour caractériser la ductilité d'un matériau, le concept de courbe limite de formage (CLF) est communément utilisé. Ce concept, initialement introduit par Keeler et Backofen (1963), permet de représenter la limite de formabilité dans l'espace plan des déformations principales de la tôle. Pour déterminer une CLF, le matériau étudié est soumis à des chargements biaxiaux, appliqués selon différents trajets de déformation, allant de la traction uniaxiale à l'expansion équibiaxiale. Pour chaque trajet de chargement imposé, les déformations principales (dans le plan de la tôle) correspondant à l'apparition de la striction localisée sont déterminées. On obtient ainsi une courbe, dite CLF, qui sépare l'espace des déformations principales de la tôle en deux parties. La partie se situant en-dessous de la CLF est la zone considérée comme sûre. Les opérations de mise en forme sont donc calibrées de manière à ce que les déformations principales engendrées se situent en dessous de cette CLF, dans le but d'obtenir des pièces sans défauts. Les premiers travaux consacrés à la détermination des CLF sont essentiellement expérimentaux (Keeler et Backofen, 1963 ; Goodwin, 1968). Cependant, les expérimentateurs qui réalisent les CLF sont confrontés à de nombreuses difficultés pratiques, tel que le coût élevé de la mise en œuvre des méthodes expérimentales, et l'absence parfois de normes strictes standardisées pouvant ainsi conduire à une forte variabilité des résultats d'un laboratoire d'essais à l'autre. Face à ces difficultés pratiques, de nombreux travaux ont été entrepris depuis plusieurs décennies pour développer des méthodes alternatives basées sur des approches théoriques (analytiques et/ou numériques). Ces approches théoriques reposent essentiellement sur le couplage d'un critère de striction localisée et un modèle de comportement décrivant l'évolution des grandeurs mécaniques du matériau étudié. Parmi les critères de striction localisée utilisés dans la littérature, nous pouvons citer la théorie de bifurcation (Rudnicki et Rice, 1975 ; Stören et Rice, 1975 ; Rice, 1976), l'approche d'imperfection initiale de Marciniak–Kuczynski (Marciniak et Kuczynski, 1967 ; Hutchinson et al., 1978b) et l'analyse de stabilité par perturbation linéarisée (Dudzinski et Molinari, 1991 ; Toth et al., 1996). Les approches utilisées pour modéliser le comportement mécanique des matériaux peuvent être classées en deux grandes familles : les approches phénoménologiques et les approches multi-échelles.

Objectifs de la thèse

Le travail actuel s'inscrit dans le cadre des approches théoriques précédemment citées et vise à concevoir et à développer un outil numérique capable de prédire d'une manière fiable et robuste les limites de ductilité des matériaux métalliques. Pour développer cet outil numérique, la modélisation multi-échelles est privilégiée par rapport aux approches phénoménologiques. Ce choix est motivé par le fait que, à la différence des approches phénoménologiques, les approches multi-échelles permettent de prendre en compte explicitement l'effet de paramètres microstructuraux essentiels, tels que les textures cristallographique et morphologique (initiales et induites), sur le comportement macroscopique du matériau étudié et par conséquent sur sa ductilité. Le modèle autocohérent est utilisé dans ce travail comme schéma de transition d'échelles pour déterminer le comportement d'un agrégat polycristallin (supposé représentatif du matériau étudié) à partir du comportement des monocristaux constitutifs. Le comportement à l'échelle microscopique (en l'occurrence celle du monocristal) est formulé dans le cadre des grandes déformations élastoplastiques. Deux différentes versions du critère de Schmid sont utilisées pour modéliser l'écoulement plastique monocristallin : la version classique de ce critère et l'une de ses versions régularisées. Cette modélisation micro-macro est couplée à deux approches de prédiction de la localisation de la déformation plastique : la théorie de bifurcation et l'approche d'imperfection initiale de Marciniak–Kuczynski (M–K). Ce travail s'inscrit dans la continuité des travaux antérieurs réalisés au sein de l'équipe MeNu. En effet, l'approche micromécanique autocohérente avait été utilisée dans les thèses de Lorrain (2005) et Franz (2008) pour modéliser le comportement des agrégats polycristallins. Dans ces deux derniers travaux, seule l'approche de bifurcation avait été utilisée pour prédire la perte de ductilité des matériaux polycristallins étudiés. La contribution actuelle permet de compléter les études précédentes (Lorrain, 2005 ; Franz, 2008) en renforçant substantiellement la modélisation autocohérente et en la couplant avec le critère d'imperfection initiale. Ce nouveau couplage permet de comparer les limites de formabilité prédites par le critère de bifurcation à celles obtenues par l'approche d'imperfection initiale. Par rapport aux travaux de la littérature, la contribution actuelle représente une avancée importante car elle permet de coupler, pour la première fois, l'approche élastoplastique autocohérente avec le critère de Marciniak–Kuczynski. En effet, outre son couplage plus largement répandu avec des modélisations phénoménologiques du comportement, l'approche M–K n'a été couplée avec une modélisation multi-échelles autocohérente que dans le cadre viscoplastique (voir, par exemple, Signorelli et al., 2009 ; Serenelli et al., 2011 ; Signorelli et al., 2012). Cependant, le couplage d'une telle formulation viscoplastique avec le critère de bifurcation ne permet pas d'obtenir des limites de formabilité à des niveaux réalistes de déformation, ce qui n'est pas le cas d'une formulation élastoplastique basée sur l'utilisation du critère classique de Schmid, comme celle utilisée dans la contribution actuelle. En effet, dans le cadre élastoplastique, la formation de points de vertex sur les points courants de la surface de plasticité de Schmid s'accompagne d'une réduction importante des

composantes de cisaillement du module tangent effectif, permettant ainsi des prédictions réalistes de la localisation de la déformation plastique. De plus, une formulation élastoplastique semble plus adaptée qu'une formulation viscoplastique dans le cadre de la modélisation des procédés de mise en forme à froid. Il est à noter également que la comparaison entre la théorie de bifurcation et celle de l'approche d'imperfection initiale, dans le cadre d'une modélisation multi-échelles du comportement, n'a fait l'objet d'une étude que récemment (Yoshida et Kuroda, 2012). Toutefois, cette dernière contribution s'est limitée au cas le plus simple du modèle de transition d'échelles de Taylor–Lin. Malgré son utilisation très répandue, due certainement à la simplicité de son implantation numérique, le modèle de Taylor–Lin présente plusieurs limitations par rapport à l'approche autocohérente utilisée dans la contribution actuelle. Ces limitations seront détaillées dans le second chapitre de ce manuscrit. Nous pensons que le fait que le couplage entre l'approche élastoplastique autocohérente et l'approche d'imperfection initiale n'ait jamais été entrepris auparavant est dû à plusieurs difficultés d'ordre théorique et numérique. En effet, ce couplage conduit à un problème fortement non linéaire, à trois niveaux. Une première non-linéarité se situe à l'échelle microscopique et est liée à la formulation et à l'intégration numérique des équations du monocristal en grandes déformations élastoplastiques. Une seconde non-linéarité est rencontrée à l'échelle du polycristal et est due au caractère fortement implicite des équations gouvernant le modèle de transition d'échelles autocohérent. Enfin, le troisième type de non-linéarités est lié aux équations relatives à l'approche M–K (équations de comptabilité et d'équilibre) qu'il convient de résoudre itérativement pour chaque trajet de chargement et chaque orientation initiale de la bande de localisation. Pour traiter efficacement ces différentes équations fortement non linéaires, nous avons développé des schémas numériques fiables et robustes à toutes les échelles de cette étude. Compte tenu des objectifs ci-dessus exposés, ce travail de thèse se place dans le cadre de la mécanique numérique, avec une attention particulière accordée aux aspects numériques et algorithmiques relatifs au développement de l'outil de prédiction de formabilité. Ainsi, les contributions visées par ce travail de thèse sont à dominante numérique et algorithmique.

Organisation et contenu du mémoire

Ce mémoire de thèse s'articule autour de trois principaux chapitres, précédés par une « Introduction générale » et suivis par des « Conclusions générales et perspectives ». Le contenu des trois principaux chapitres est décrit dans ce qui suit :

- Le premier chapitre est dédié à la modélisation du comportement du monocristal en grandes déformations élastoplastiques. Ainsi, les relations constitutives pertinentes à l'échelle monocristalline seront présentées en détails. Une attention particulière sera accordée aux aspects relatifs aux grandes déformations, à savoir le problème de décomposition de la transformation et le problème d'objectivité des lois de comportement. L'écoulement plastique du monocristal sera modélisé successivement par deux critères de plasticité : la forme classique du critère de Schmid

et l'une de ses formes régularisées. Nous développerons ensuite deux algorithmes numériques qui permettent d'intégrer les équations constitutives à l'échelle monocristalline. Les modules tangents analytique (nécessaire pour l'analyse de bifurcation) et consistent (indispensable pour l'implantation dans un code de calcul par éléments finis) seront déduits à partir des équations constitutives et des schémas d'intégration développés. Ce chapitre sera clôturé par plusieurs prédictions numériques qui permettent de comparer les deux algorithmes développés en termes de précision, robustesse et efficacité et de mettre en évidence leurs avantages ou inconvénients pour un choix éclairé parmi ces schémas numériques. L'effet de la régularisation de la surface de Schmid sur les prédictions numériques (courbes rhéologiques, morphologies des surfaces de charge, évolution des composantes du module tangent microscopique) sera également analysé dans ce chapitre.

- Le second chapitre traitera de la modélisation du comportement mécanique à l'échelle du polycristal. D'abord, les différentes relations qui constituent le cadre théorique du modèle autocohérent seront présentées d'une manière très exhaustive. Les calculs du module tangent macroscopique ainsi que le tenseur d'interaction de Hill dans le cadre des grandes déformations élastoplastiques seront particulièrement détaillés. Ensuite, les algorithmes développés et utilisés pour résoudre les équations du modèle autocohérent seront exposés. Une nouvelle technique de résolution, basée sur la méthode de Newton–Raphson, est développée pour déterminer le module tangent macroscopique. Enfin, plusieurs prédictions numériques obtenues par application des schémas numériques proposés seront présentées et discutées. La différence entre les prédictions basées sur l'approche autocohérente et celles obtenues avec le modèle de Taylor–Lin sera particulièrement illustrée (courbes rhéologiques, surfaces de charge, évolution des coefficients de Lankford, évolution des textures cristallographiques et morphologiques, évolution des composantes des modules tangents macroscopiques). Des études de sensibilité seront également menées pour quantifier l'impact sur la réponse macroscopique de plusieurs paramètres et choix de modélisation (type d'élasticité et d'écrouissage microscopique, textures cristallographique et morphologique initiales, régularisation de la surface de charge microscopique…). La performance du schéma numérique développé pour résoudre les équations du modèle autocohérent (basé sur la méthode de Newton–Raphson) sera mise en évidence en comparant les prédictions obtenues par ce schéma avec celles données par la méthode classique du point fixe.
- Dans le troisième chapitre, nous nous intéresserons à la prédiction des CLF et des déformations limitant la formabilité lors des opérations de mise en forme. Le critère de bifurcation ainsi que l'approche d'imperfection initiale seront d'abord formulés sous l'hypothèse des contraintes planes. L'approche eulérienne est privilégiée pour formuler ces critères de localisation de la déformation plastique. Ensuite, les méthodes numériques développées pour résoudre les

équations gouvernant ces critères seront extensivement détaillées. Une attention particulière sera accordée au couplage numérique entre le modèle autocohérent et les différents critères de localisation. Enfin, les résultats numériques en termes de CLF seront présentés. Les prédictions obtenues par l'application de la théorie de bifurcation seront comparées à celles données par l'approche d'imperfection initiale. Des études de sensibilité, similaires à celles conduites dans le chapitre précédent, seront menées pour analyser l'impact de plusieurs paramètres et choix de modélisation (schéma de transition d'échelles, texture cristallographique, régularisation de la loi de Schmid) sur la forme et le niveau des CLF prédites. Les approches de localisation développées seront également étendues à la prédiction de ductilité de matériaux formés de bicouches (dont l'une est une couche de métal, et l'autre une couche d'élastomère). Enfin, pour montrer les capacités et le potentiel de l'outil de prédiction développé, l'approche de bifurcation sera également utilisée pour prédire l'apparition de striction localisée sur des pièces embouties. Les simulations d'emboutissage associées seront réalisées à l'aide du code de calcul par éléments finis ABAQUS.

Chapitre 1

Intégration numérique de la loi de comportement d'un monocristal en grandes déformations élastoplastiques

1.1 Introduction

Il existe une forte corrélation entre le comportement macroscopique d'un matériau et les différents mécanismes de déformation agissant à des échelles plus fines (microscopique, mésoscopique, …). Une description rigoureuse du comportement mécanique à ces échelles fines s'avère donc nécessaire pour développer des modèles de comportement fiables et précis. Par exemple, dans le cadre de la modélisation des opérations de mise en forme des métaux à froid, il apparaît adéquat de considérer le monocristal comme constituant microscopique indivisible du matériau, au sein duquel la déformation plastique est principalement due aux glissements sur les systèmes cristallographiques (Taylor et Elam, 1923). Les autres mécanismes de déformation, tels que le maclage, la transformation de phase ou la diffusion, ne seront pas pris en compte dans le cadre de ce travail. Nous supposons également que le glissement est multiple (c.à.d. selon plusieurs systèmes de glissement) et homogène à l'intérieur des grains. Ce glissement homogène est caractérisé par une répartition spatiale aléatoire des dislocations et par leur nombre relativement faible. Ce type de répartition permet de décrire de manière phénoménologique l'écrouissage du matériau par l'introduction d'une matrice d'écrouissage reliant les taux des cissions critiques des différents systèmes cristallographiques à leurs vitesses de glissement. Lorsque l'on admet que le glissement est hétérogène au sein du grain, une modélisation de

l'écrouissage à l'échelle des dislocations devient naturellement plus pertinente (Peeters et al., 2001 ; Peeters, 2002).

Il est bien connu que les opérations de mise en forme des métaux à froid sont très peu sensibles à la vitesse de déformation de la matière. Ainsi, une modélisation élastoplastique indépendante du temps semble plus appropriée qu'une modélisation élastoviscoplastique. Cependant, l'utilisation d'une formulation élastoplastique pour modéliser le comportement monocristallin pose parfois le problème d'indétermination des vitesses de glissement des différents systèmes cristallographiques. En effet, s'il est admis que le tenseur taux de déformation plastique se décompose par projection sur les tenseurs d'orientation de Schmid qui caractérisent les systèmes de glissement (Taylor, 1938), la détermination des vitesses de glissement qui ne sont autres que les multiplicateurs plastiques associés à ces tenseurs d'orientation ne fait pas l'unanimité. Ce tenseur de déformation plastique est défini par 5 composantes indépendantes (comme il est en effet symétrique et déviatorique), alors qu'on dénombre plus de 5 systèmes de glissement préférentiels au sein de chaque monocristal : 12 systèmes pour les matériaux à structure cristallographique cubique à faces centrées (CFC) et 24 pour les matériaux à structure cristallographique cubique centrée (CC). Le nombre plus élevé des systèmes de glissement, par rapport au nombre de composantes indépendantes du tenseur de déformation plastique, rend ambigu la détermination des vitesses de glissement des différents systèmes cristallographiques. Taylor (1938) a proposé, pour le cas d'un comportement rigide plastique, que le tenseur de déformation soit accommodé par 5 systèmes actifs sélectionnés suivant un critère de minimisation de la somme des vitesses de glissement. Par ailleurs, le critère de Schmid (Schmid, 1924), qui est basé sur des considérations expérimentales solides, stipule que le glissement n'a lieu sur un système cristallographique que lorsque sa cission résolue atteint sa cission critique (ce critère sera détaillé dans la Section 1.3.1). Le caractère discret (ou non continu) de ce critère s'illustre par le fait que même pour un système ayant une cission résolue "très proche" mais inférieure à sa cission critique, la vitesse de glissement correspondante reste nulle. La surface de charge associée à ce critère est donc une surface formée d'hyperplans. Lorsque l'état de contrainte ne se situe pas à l'intersection de ces hyperplans, les systèmes de glissement accommodant la déformation plastique peuvent être déterminés sans ambiguïté en appliquant la loi de normalité (et par suite la condition de cohérence). En revanche, lorsque le point représentatif de l'état de contrainte se trouve à l'intersection de plusieurs hyperplans (connue sous l'appellation de 'point de vertex'), le vecteur normal sortant à la surface de charge n'est pas défini de façon unique. En effet, dans ce cas, la normale sortante à la surface de charge appartient à un cône convexe et fermé. Il en résulte que l'application de la loi de normalité ne permet pas de déterminer de façon unique les vitesses de glissement des systèmes cristallographiques. Cela se traduit mathématiquement par la résolution d'un système mal conditionné. Dans le cadre du critère de Schmid, Bishop et Hill (1951) ont proposé une méthode de détermination des vitesses de glissement des systèmes cristallographiques en se basant sur le principe du travail maximal pour résoudre le

problème d'ambigüité. Ils ont montré que le critère proposé est équivalent à celui de Taylor (1938), lorsque l'écrouissage latent n'est pas pris en compte. Une généralisation du critère de Bishop et Hill (1951) a été proposée par la suite (Fortunier, 1989). Ce critère généralisé permet de choisir parmi toutes les combinaisons admissibles des systèmes de glissement (et des vitesses de glissement correspondantes) celles qui maximisent la dissipation plastique engendrée. Hill (1966) a démontré le lien entre le problème d'unicité et la matrice d'écrouissage. En effet, lorsque cette dernière est définie positive, les vitesses de glissement sont déterminées de façon unique. Par ailleurs, lorsque la matrice d'écrouissage n'est pas définie positive, de nombreuses stratégies numériques sont envisagées pour résoudre le problème mal conditionné. Parmi celles-ci, nous pouvons citer la technique de pseudo-inversion utilisée par Anand et Kothari (1996) ou de l'inversion généralisée introduite par Miehe (1996) pour inverser la matrice jacobienne du système mathématique représentant la condition de cohérence. Nous citerons également la technique de perturbation des composantes diagonales de cette matrice jacobienne (Miehe et Schröder, 2001) ou des cissions critiques (Ben Bettaieb et al., 2012). Une autre approche utilisée pour lever l'indétermination des vitesses de glissement (qui est cette fois-ci liée à la modification des relations constitutives du monocristal plutôt qu'à une méthode numérique) consiste à adopter une formulation viscoplastique. Cette approche viscoplastique a été initialement proposée par Hutchinson (1976), pour le cas rigide (sans élasticité), et a été étendue au cas élastoviscoplastique par Asaro et Needleman (1985). Une telle formulation viscoplastique permet d'exprimer, d'une manière directe, la vitesse de glissement en fonction de la cission critique et la cission résolue du système cristallographique considéré. Malgré cet avantage, l'utilisation de l'approche viscoplastique pour la prédiction des limites de ductilité des matériaux métalliques (qui est l'objectif principal de cette thèse) pose deux problèmes majeurs par rapport à l'utilisation d'une approche élastoplastique. Le premier problème est d'ordre pratique et est lié à l'efficacité des simulations. En effet, le temps de calcul nécessaire pour l'intégration d'un modèle viscoplastique est beaucoup plus important que pour un modèle élastoplastique, en particulier lorsque le paramètre de sensibilité à la vitesse de déformation est considéré très faible, comme c'est le cas en mise en forme des métaux à froid (Kalidindi et al., 1992 ; Anand et Kalidindi, 1994). Le second problème est plus fondamental et est lié à l'inapplicabilité de l'approche de bifurcation (voir Chapitre 3) pour la prédiction des limites de ductilité (ou de formabilité). En effet, le module tangent élastoplastique (qui est l'ingrédient principal dans l'application de l'analyse de bifurcation pour un comportement indépendant du temps physique) se trouve réduit au module élastique dans le cas d'une approche élastoviscoplastique. Par conséquent, la bifurcation ne peut être atteinte qu'à des niveaux très élevés et non réalistes de déformation. Une approche alternative, présentant les mêmes avantages que l'approche viscoplastique mais basée cette fois-ci sur une formulation élastoplastique, consiste à utiliser une forme régularisée de la loi de Schmid (ce qui a pour conséquence d'arrondir la surface de charge de Schmid aux points de vertex). L'utilisation d'une telle forme régularisée permet de

déterminer de manière unique les vitesses de glissement des différents systèmes cristallographiques. Parmi les différentes méthodes de régularisation développées dans la littérature, nous présenterons dans ce chapitre une approche basée sur les travaux de Gambin (Gambin, 1991 ; Gambin, 1992 ; Gambin et Barlat, 1997).

La suite du chapitre sera scindée en quatre sections principales. Dans la Section 1.2, nous détaillerons les différentes équations décrivant le comportement élastoplastique monocristallin en grandes déformations, en utilisant aussi bien le critère de Schmid que sa forme régularisée pour modéliser l'écoulement plastique. La Section 1.3 sera consacrée à l'intégration numérique de ces relations constitutives. Dans la Section 1.4, nous présenterons une autre formulation de la loi de comportement du monocristal qui est basée sur les travaux de Hill et Rice (1972). Par rapport à la formulation classique présentée dans la Section 1.2, la formulation développée par Hill et Rice (1972) permet de prendre en compte l'influence de la distorsion du réseau cristallographique sur le comportement plastique. Enfin, la Section 1.5 sera consacrée à la présentation et à la discussion des différents résultats numériques relatifs aux divers algorithmes développés dans la Section 1.3.

1.2 Description du comportement élastoplastique du monocristal en grandes déformations

1.2.1 Décomposition de la transformation élastoplastique

À l'échelle microscopique, la déformation par mode de glissement multiple et homogène, résultant de la propagation des dislocations au sein du réseau cristallographique, est le mécanisme de déformation plastique prépondérant au sein des matériaux à structure cubique, lors des opérations de mise en forme à froid. La représentation de ce phénomène physique par des modèles numériques remonte, entre autres, aux travaux de Taylor (1938), Mandel (1965) et Hill (1966), où les équations constitutives sont limitées au cas des petites déformations. Les travaux menés par Rice (1971), Hill et Rice (1972), Asaro et Rice (1977) et Asaro (Asaro, 1983a ; Asaro, 1983b) ont apporté une contribution majeure à la modélisation du comportement monocristallin en grandes déformations. Les fondements théoriques de ces modèles, qui font office de référence dans la littérature, sont basés sur l'existence d'une infinité de configurations relaxées de contrainte, dans lesquelles le matériau subit une déformation purement plastique par glissement sur des plans cristallographiques. Nous désignerons par Ω_I la configuration relaxée (dite aussi intermédiaire) qui coïncide avec le réseau cristallographique. Par ailleurs, nous désignerons par Ω_0 la configuration initiale du monocristal au début de la transformation et par Ω la configuration déformée obtenue par la transformation $\mathbf{f}$. Sauf mention contraire, le référentiel galiléen dans lequel sont exprimées toutes les grandeurs vectorielles et tensorielles introduites dans ce rapport est noté $\mathcal{R}$.

Le gradient de transformation $\mathbf{f}$ appliqué au monocristal se décompose multiplicativement en une contribution plastique $\mathbf{f}^{p}$ et une contribution élastique $\mathbf{f}^{e}$ (Lee, 1969). La transformation élastique $\mathbf{f}^{e}$ est elle-même décomposée en une rotation pure $\mathbf{r}$ et une déformation élastique pure $\mathbf{v}^{e}$ du réseau cristallographique. La rotation $\mathbf{r}$ du réseau cristallin est caractérisée par les trois angles d'Euler notés respectivement $\varphi_1, \varphi_g, \varphi_2$. Elle est définie par la relation ci-après :

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} \cos\varphi_1\cos\varphi_2 - \sin\varphi_1\sin\varphi_2\cos\varphi_g & -\sin\varphi_2\cos\varphi_1 - \cos\varphi_2\sin\varphi_1\cos\varphi_g & \sin\varphi_1\sin\varphi_g \\ \cos\varphi_2\sin\varphi_1 + \sin\varphi_2\cos\varphi_1\cos\varphi_g & -\sin\varphi_1\sin\varphi_2 + \cos\varphi_1\cos\varphi_2\cos\varphi_g & -\cos\varphi_1\sin\varphi_g \\ \sin\varphi_2\sin\varphi_g & \cos\varphi_2\sin\varphi_g & \cos\varphi_g \end{pmatrix} \tag{1.1}$$

La matrice de rotation $\mathbf{r}$ peut également être considérée comme l'orientation de la configuration intermédiaire Ω_I par rapport à la configuration déformée Ω. Cette rotation est le produit de trois rotations simples déterminées par les angles d'Euler :

- La première rotation, d'angle φ_1, permet de passer du repère $(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{y}}, \vec{\mathbf{z}})$ lié à la configuration déformée à un repère $(\vec{\mathbf{x}}_1, \vec{\mathbf{y}}_1, \vec{\mathbf{z}}_1)$. Cette rotation se faisant autour de l'axe $\vec{\mathbf{z}}$, nous avons naturellement $\vec{\mathbf{z}}_1 = \vec{\mathbf{z}}$.
- La deuxième rotation, autour de $\vec{\mathbf{x}}_1$ et d'angle φ_g, permet de passer du repère $(\vec{\mathbf{x}}_1, \vec{\mathbf{y}}_1, \vec{\mathbf{z}}_1)$ à un repère $(\vec{\mathbf{x}}_2, \vec{\mathbf{y}}_2, \vec{\mathbf{z}}_2)$, avec $\vec{\mathbf{x}}_2 = \vec{\mathbf{x}}_1$.
- La troisième rotation, autour de $\vec{\mathbf{z}}_2$ et d'angle φ_2, permet de passer du repère $(\vec{\mathbf{x}}_2, \vec{\mathbf{y}}_2, \vec{\mathbf{z}}_2)$ au repère $(\vec{\mathbf{x}}', \vec{\mathbf{y}}', \vec{\mathbf{z}}')$ lié à la configuration intermédiaire, avec $\vec{\mathbf{z}}' = \vec{\mathbf{z}}_2$.

Dans l'équation (1.1), les colonnes de la matrice de rotation $\mathbf{r}$ sont tout simplement les composantes des vecteurs $\vec{\mathbf{x}}'$, $\vec{\mathbf{y}}'$ et $\vec{\mathbf{z}}'$ dans le repère $(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{y}}, \vec{\mathbf{z}})$. La Fig. 1.1 fournie une description géométrique de la décomposition de ces rotations.

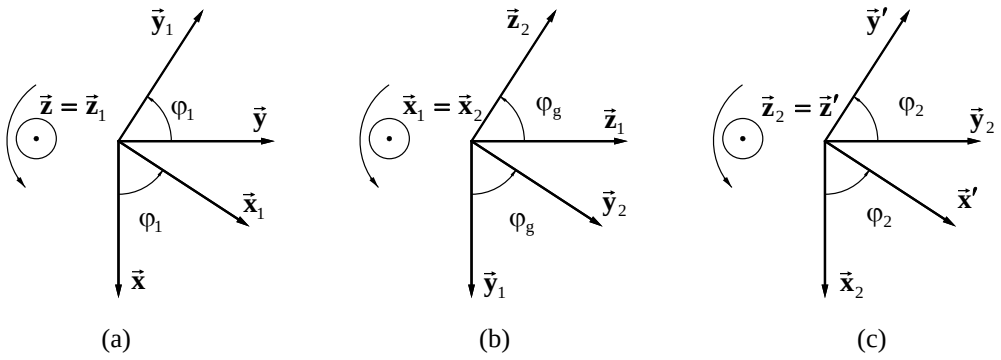


Fig. 1.1. Illustration de l'orientation du repère $(\vec{\mathbf{x}}', \vec{\mathbf{y}}', \vec{\mathbf{z}}')$, lié à la configuration intermédiaire, par rapport au repère $(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{y}}, \vec{\mathbf{z}})$ lié à la configuration déformée : (a) Rotation autour de l'axe $\vec{\mathbf{z}}$; (b) Rotation autour de l'axe $\vec{\mathbf{x}}_1$; (c) Rotation autour de l'axe $\vec{\mathbf{z}}_2$.

Le gradient de vitesse $\mathbf{g}$ est défini par l'expression suivante :

$$\begin{aligned}\mathbf{g} &= \dot{\mathbf{f}}.\mathbf{f}^{-1} = \dot{\mathbf{f}}^{e}.\mathbf{f}^{e-1} + \mathbf{f}^{e}.\dot{\mathbf{f}}^{p}.\mathbf{f}^{p-1}.\mathbf{f}^{e-1} \\ &= \dot{\mathbf{v}}^{e}.\mathbf{v}^{e-1} + \mathbf{v}^{e}.\dot{\mathbf{r}}.\mathbf{r}^{T}.\mathbf{v}^{e-1} + \mathbf{v}^{e}.\mathbf{r}.\dot{\mathbf{f}}^{p}.\mathbf{f}^{p-1}.\mathbf{r}^{T}.\mathbf{v}^{e-1}\end{aligned} \tag{1.2}$$

Dans les métaux, la déformation induit généralement une très faible variation de volume. Par conséquent, le tenseur $\mathbf{v}^{e}$ caractérisant la dilatation du réseau cristallographique est très proche du tenseur identité d'ordre 2 noté $\mathbf{I}_2$:

$$\mathbf{v}^{e} \approx \mathbf{I}_2 \tag{1.3}$$

En combinant les équations (1.2) et (1.3), on obtient la relation suivante :

$$\mathbf{g} = \dot{\mathbf{v}}^{e} + \dot{\mathbf{r}}.\mathbf{r}^{T} + \mathbf{r}.\dot{\mathbf{f}}^{p}.\mathbf{f}^{p-1}.\mathbf{r}^{T} \tag{1.4}$$

En utilisant l'équation (1.4), on peut décomposer le taux de déformation $\mathbf{d}$ (la partie symétrique de $\mathbf{g}$) et le taux de rotation $\mathbf{w}$ (la partie antisymétrique de $\mathbf{g}$) en parties élastiques et plastiques :

$$\begin{aligned}\mathbf{d}^{p} &= \frac{1}{2}\mathbf{r}.\left(\dot{\mathbf{f}}^{p}.\mathbf{f}^{p-1} + \left(\dot{\mathbf{f}}^{p}.\mathbf{f}^{p-1}\right)^{T}\right).\mathbf{r}^{T} \quad ; \quad \mathbf{d}^{e} = \mathbf{d} - \mathbf{d}^{p} = \dot{\mathbf{v}}^{e} \\ \mathbf{w}^{p} &= \frac{1}{2}\mathbf{r}.\left(\dot{\mathbf{f}}^{p}.\mathbf{f}^{p-1} - \left(\dot{\mathbf{f}}^{p}.\mathbf{f}^{p-1}\right)^{T}\right).\mathbf{r}^{T} \quad ; \quad \mathbf{w}^{e} = \mathbf{w} - \mathbf{w}^{p} = \dot{\mathbf{r}}.\mathbf{r}^{T}\end{aligned} \tag{1.5}$$

où les exposants e et p désignent les contributions élastiques et plastiques, respectivement.

1.2.2 Cinématique discrète du monocristal

Les glissements cristallographiques ne sont pas aléatoires, mais s'effectuent plutôt sur des systèmes préférentiels. Ceux-ci sont référencés par des plans et plus précisément par des directions de glissement au sein de ces plans. Le nombre de ces systèmes varie suivant la structure cristallographique du matériau utilisé. Entre autres, ce nombre est de 12 ou 24 pour les matériaux de type cubique centré (α-Fe, β-Ti, Nb, Mo), de 12 pour les matériaux de type cubique à faces centrées (Al, Cu, Au, Ag), et de 3 ou 6 pour les matériaux de type hexagonal compact (Zn, α-Ti, Mg, Be). Dans toute la suite de ce manuscrit, ce nombre sera désigné de façon générique par N_s. Pour le cas des structures cubiques centrées et cubiques à faces centrées, la liste des systèmes de glissement est donnée dans l'Annexe A en suivant la convention de Miller. Dans la configuration déformée, chaque système de glissement est défini par deux vecteurs unitaires, notés respectivement $\vec{\mathbf{m}}^{\alpha}$ et $\vec{\mathbf{n}}^{\alpha}$, où $\vec{\mathbf{m}}^{\alpha}$ est colinéaire au vecteur de Burgers et représente la direction de glissement restreinte dans un plan de glissement, et $\vec{\mathbf{n}}^{\alpha}$ est le vecteur normal à ce plan de glissement. Le produit tensoriel $\vec{\mathbf{m}}^{\alpha} \otimes \vec{\mathbf{n}}^{\alpha}$, que nous notons $\mathbf{M}^{\alpha}$, est appelé tenseur d'orientation de Schmid. Les parties symétrique et antisymétrique de $\mathbf{M}^{\alpha}$ seront respectivement notées $\mathbf{R}^{\alpha}$ et $\mathbf{S}^{\alpha}$ dans toute la suite de ce chapitre. Dans le cas particulier du comportement du monocristal, la rotation $\mathbf{r}$ introduite dans l'équation (1.1) est choisie de manière à coïncider avec la rotation du réseau cristallin, ce qui lève l'arbitraire sur la définition de

la configuration intermédiaire. Avec ce choix, les vecteurs $\vec{\mathbf{m}}_0^\alpha$ et $\vec{\mathbf{n}}_0^\alpha$, qui sont les transports des vecteurs $\vec{\mathbf{m}}^\alpha$ et $\vec{\mathbf{n}}^\alpha$ dans la configuration intermédiaire, restent constants durant la déformation. La relation de transport qui relie ces vecteurs à leurs homologues de la configuration déformée s'obtient par transformation élastique (voir Fig. 1.2) :

$$\forall \alpha = 1,...,2N_s : \quad \vec{\mathbf{m}}^\alpha = \mathbf{f}^e . \vec{\mathbf{m}}_0^\alpha \quad ; \quad \vec{\mathbf{n}}^\alpha = \left(\mathbf{f}^e\right)^{-T} . \vec{\mathbf{n}}_0^\alpha \tag{1.6}$$

La déformation élastique $\mathbf{v}^e$ du réseau cristallographique étant très proche du tenseur $\mathbf{I}_2$ (comme indiqué dans la relation (1.3)), les équations (1.6) peuvent être simplifiées sous la forme suivante (Iwakuma et Nemat-Nasser, 1984) :

$$\forall \alpha = 1,...,2N_s : \quad \vec{\mathbf{m}}^\alpha = \mathbf{r} . \vec{\mathbf{m}}_0^\alpha \quad ; \quad \vec{\mathbf{n}}^\alpha = \mathbf{r} . \vec{\mathbf{n}}_0^\alpha \tag{1.7}$$

Les taux de déformation et de rotation plastiques $\mathbf{d}^p$ et $\mathbf{w}^p$ se décomposent respectivement par projection sur les parties symétriques et antisymétriques des tenseurs d'orientation de Schmid (Taylor, 1938) :

$$\mathbf{d}^p = \dot{\gamma}^\alpha \mathbf{R}^\alpha \quad ; \quad \mathbf{w}^p = \dot{\gamma}^\alpha \mathbf{S}^\alpha \quad ; \quad \alpha = 1,...,2N_s \tag{1.8}$$

où $\dot{\gamma}^\alpha$ est la vitesse de glissement du système α qui ne peut être que strictement positive ou nulle. Le système de glissement α est dit actif lorsque sa vitesse de glissement $\dot{\gamma}^\alpha$ est strictement positive. Il faut remarquer que dans la relation (1.8), le nombre de systèmes de glissement initial N_s est dédoublé de manière à n'obtenir que des vitesses de glissement positives ou nulles. En effet, contrairement au cas du maclage, où le cisaillement entre deux mailles adjacentes ne peut se faire que dans un sens, la diffusion des dislocations qui caractérise le glissement sur les plans cristallographiques s'effectue dans les deux sens, aboutissant ainsi à des vitesses de glissement négatives par rapport au sens d'orientation choisi. Par souci de commodité, il est préférable de ne manipuler que des vitesses de glissement positives ou nulles. De ce fait, tout système initial α est décomposé en deux systèmes différents d'orientations opposées ($\vec{\mathbf{m}}^{\alpha_1}$, $\vec{\mathbf{n}}^{\alpha_1}$) et ($\vec{\mathbf{m}}^{\alpha_2}$, $\vec{\mathbf{n}}^{\alpha_2}$), tels que $\vec{\mathbf{m}}^{\alpha_2} = -\vec{\mathbf{m}}^{\alpha_1}$ et $\vec{\mathbf{n}}^{\alpha_2} = \vec{\mathbf{n}}^{\alpha_1}$, avec $\alpha_1 = \alpha$ et $\alpha_2 = \alpha + N_s$. Il en résulte que le nombre total de systèmes de glissement passe de N_s à $2N_s$. Les vitesses de glissement étant désormais des variables positives ou nulles, elles peuvent être considérées dans le cadre de la théorie élastoplastique comme des multiplicateurs plastiques que l'on calcule en se basant sur la loi d'écoulement plastique. Dans la littérature, on recense principalement deux types de fonctions de charge utilisés pour décrire l'écoulement élastoplastique au sein du monocristal : le critère de Schmid et la forme régularisée du critère de Schmid. La Section 1.2.3 expose en détail ces différentes fonctions de charge utilisées pour décrire le comportement du monocristal.

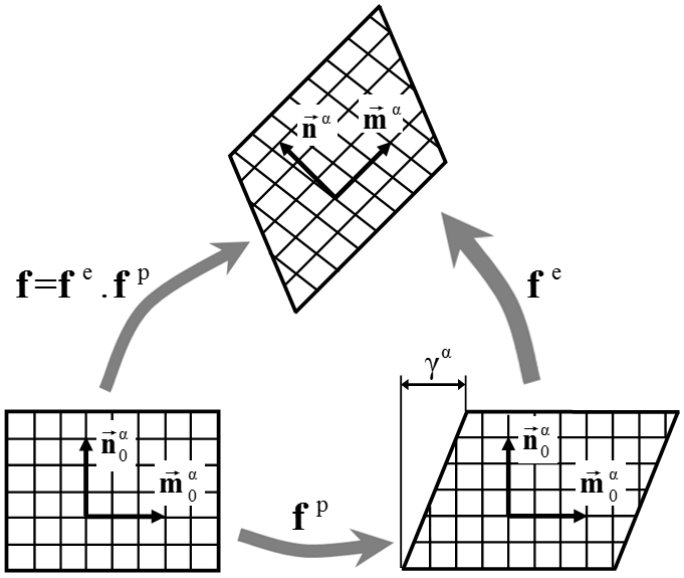


Fig. 1.2. Représentation schématique de la décomposition du gradient de transformation : glissement plastique suivi d'une rotation du réseau cristallographique et de sa distorsion.

1.2.3 Lois d'écoulement et calcul des vitesses de glissement

Dans la section précédente, les différentes relations cinématiques décrivant la déformation du monocristal ont été détaillées. Dans la section courante, les différentes approches adoptées pour calculer les vitesses de glissement caractérisant l'écoulement plastique seront exposées. Pour décrire l'écoulement plastique au sein du monocristal, il faut introduire les notions de cission résolue τ^α et de cission critique τ_c^α relatives au système cristallographique α. En effet, à l'échelle du monocristal, il est commun d'exprimer les lois d'écoulement plastique à l'aide de ces notions de cissions résolues et critiques des différents systèmes de glissement. La cission résolue τ^α est définie comme étant la projection du vecteur contrainte $\boldsymbol{\sigma}.\vec{\mathbf{n}}^\alpha$ (où $\boldsymbol{\sigma}$ est la contrainte de Cauchy) sur le plan de glissement relatif au système α :

$$\forall \alpha = 1,...,2N_s : \quad \tau^\alpha = \vec{\mathbf{m}}^\alpha . \boldsymbol{\sigma} . \vec{\mathbf{n}}^\alpha = \mathbf{R}^\alpha : \boldsymbol{\sigma} \tag{1.9}$$

La cission critique, quant à elle, permet de décrire le durcissement ou l'écrouissage au sein du monocristal qui est dû aux glissements sur les plans cristallographiques.

Les vitesses de glissement des différents systèmes cristallographiques sont déterminées en appliquant la condition de cohérence. Pour appliquer cette condition, il convient d'exprimer les taux de cissions résolues et critiques en fonction des vitesses de glissement. Dans la perspective de calcul des taux de cissions résolues, nous exprimerons d'abord la dérivée co-rotationnelle de la contrainte de Cauchy, notée $\boldsymbol{\sigma}^\nabla$, en fonction des vitesses de glissement. En combinant les équations $(1.5)_{(2)}$ et $(1.8)_{(1)}$, la partie élastique du modèle de comportement du monocristal peut s'exprimer sous la forme suivante :

$$\boldsymbol{\sigma}^\nabla + \boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{Tr}(\mathbf{d}) = \mathbf{C} : \mathbf{d}^e = \mathbf{C} : \mathbf{d} - \dot{\gamma}^\alpha \mathbf{C} : \mathbf{R}^\alpha \quad ; \quad \alpha = 1,...,2N_s \tag{1.10}$$

où $\mathbf{C}$ est le tenseur d'ordre 4 obtenu par transport du tenseur des modules élastiques $\mathbf{C}_0$ de la configuration intermédiaire Ω_I à la configuration déformée. Cette relation de transport s'exprime sous la forme indicielle suivante :

$$\forall m,n,p,q=1,2,3: \quad C_{mnpq}=C_{0\,ijkl}r_{mi}r_{nj}r_{pk}r_{ql} \quad ; \quad i,j,k,l=1,2,3 \tag{1.11}$$

où $\mathbf{r}$ est la matrice de rotation introduite dans l'équation (1.1).

Le tenseur orthotrope $\mathbf{C}_0$ qui caractérise l'élasticité des matériaux à structure cubique s'exprime sous la forme suivante :

$$\mathbf{C}_0=\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \tag{1.12}$$

où C_{11}, C_{12} et C_{44} sont fonctions du module de Young E_0 d'un matériau de référence supposé isotrope. Dans le cas d'une hypothèse d'isotropie élastique du monocristal, $\mathbf{C}=\mathbf{C}_0$ avec $C_{11}=\lambda+2\mu$, $C_{12}=\lambda$ et $C_{44}=2\mu$, λ et μ étant les coefficients de Lamé. Dans le Chapitre 2 (Section 2.4.3), l'effet de l'anisotropie élastique sur le comportement d'un agrégat polycristallin sera étudié.

L'utilisation de la dérivée co-rotationnelle de la contrainte de Cauchy, notée $\boldsymbol{\sigma}^{\nabla}$ dans l'équation (1.10) , à la place de la simple dérivée temporelle $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$, utilisée habituellement dans le cas des petites déformations, permet de satisfaire le principe d'objectivité ou d'indifférence matérielle par rapport à la rotation du réseau cristallographique. Cette dérivée co-rotationnelle est définie comme suit :

$$\boldsymbol{\sigma}^{\nabla}=\dot{\boldsymbol{\sigma}}-\mathbf{w}^e.\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{\sigma}.\mathbf{w}^e \tag{1.13}$$

La dérivée de la cission résolue $\dot{\tau}^{\alpha}$ est déterminée par différentiation de l'équation (1.9) :

$$\forall \alpha=1,...,2N_s: \quad \dot{\tau}^{\alpha}=\dot{\vec{\mathbf{m}}}^{\alpha}.\boldsymbol{\sigma}.\vec{\mathbf{n}}^{\alpha}+\vec{\mathbf{m}}^{\alpha}.\dot{\boldsymbol{\sigma}}.\vec{\mathbf{n}}^{\alpha}+\vec{\mathbf{m}}^{\alpha}.\boldsymbol{\sigma}.\dot{\vec{\mathbf{n}}}^{\alpha} \tag{1.14}$$

Les vecteurs $\dot{\vec{\mathbf{m}}}^{\alpha}$ et $\dot{\vec{\mathbf{n}}}^{\alpha}$ sont déterminés par combinaison des équations $(1.5)_{(4)}$ et (1.7) :

$$\forall \alpha=1,...,2N_s: \quad \begin{cases} \dot{\vec{\mathbf{m}}}^{\alpha}=\left(\dot{\mathbf{r}}.\mathbf{r}^T\right).\vec{\mathbf{m}}^{\alpha}=\mathbf{w}^e.\vec{\mathbf{m}}^{\alpha} \\ \dot{\vec{\mathbf{n}}}^{\alpha}=\left(\dot{\mathbf{r}}.\mathbf{r}^T\right).\vec{\mathbf{n}}^{\alpha}=\mathbf{w}^e.\vec{\mathbf{n}}^{\alpha} \end{cases} \tag{1.15}$$

En insérant l'équation (1.15) dans l'équation (1.14), la dérivée de la cission résolue apparaît naturellement comme la projection de la dérivée co-rotationnelle de la contrainte de Cauchy sur le tenseur d'orientation de Schmid. On obtient en effet :

$$\begin{aligned}\forall\,\alpha=1,...,2N_s:\quad \dot{\tau}^{\alpha} &= \mathbf{w}^{e}.\vec{\mathbf{m}}^{\alpha}.\boldsymbol{\sigma}.\vec{\mathbf{n}}^{\alpha}+\vec{\mathbf{m}}^{\alpha}.\dot{\boldsymbol{\sigma}}.\vec{\mathbf{n}}^{\alpha}+\vec{\mathbf{m}}^{\alpha}.\boldsymbol{\sigma}.\mathbf{w}^{e}.\vec{\mathbf{n}}^{\alpha}\\ &= \vec{\mathbf{m}}^{\alpha}.\left(-\mathbf{w}^{e}.\boldsymbol{\sigma}+\dot{\boldsymbol{\sigma}}+\boldsymbol{\sigma}.\mathbf{w}^{e}\right).\vec{\mathbf{n}}^{\alpha}\\ &= \vec{\mathbf{m}}^{\alpha}.\boldsymbol{\sigma}^{\nabla}.\vec{\mathbf{n}}^{\alpha}=\mathbf{R}^{\alpha}:\boldsymbol{\sigma}^{\nabla}\end{aligned} \tag{1.16}$$

Grâce aux relations (1.10) et (1.16), la dérivée de la cission résolue peut finalement s'exprimer en fonction des vitesses de glissement :

$$\forall\,\alpha=1,...,2N_s:\quad \dot{\tau}^{\alpha}=\mathbf{R}^{\alpha}:\left(\mathbf{C}:\mathbf{d}-\boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{Tr}(\mathbf{d})-\dot{\gamma}^{\beta}\,\mathbf{C}:\mathbf{R}^{\beta}\right)\quad;\quad \beta=1,...,2N_s \tag{1.17}$$

L'évolution des cissions critiques des différents systèmes de glissement est déterminée par la loi d'écrouissage générique suivante :

$$\forall\,\alpha=1,...,N_s:\quad \dot{\tau}_c^{\alpha}=\dot{\tau}_c^{\alpha+N_s}=h^{\alpha\beta}\dot{\gamma}^{\beta}\quad;\quad \beta=1,...,2N_s \tag{1.18}$$

où $\mathbf{h}$ désigne la matrice d'écrouissage (de dimension $2N_s\times 2N_s$).

Dans la relation (1.18), il faut souligner la symétrie des cissions critiques par rapport au nombre physique N_s de systèmes de glissement. En effet, deux systèmes opposés, en l'occurrence α et $\alpha+N_s$, ont la même évolution de leurs cissions critiques. Par conséquent, la matrice d'écrouissage $\mathbf{h}$ vérifie la relation :

$$\forall\,\alpha,\beta=1,...,N_s:\quad h^{\alpha+N_s\,\beta}=h^{\alpha\,\beta+N_s}=h^{\alpha\beta} \tag{1.19}$$

Différentes formes de la matrice d'écrouissage $\mathbf{h}$ sont proposées dans la littérature. Dans le cadre de ce travail, deux matrices d'écrouissage seront utilisées. La première est une matrice d'écrouissage simple exprimée sous la forme d'une fonction puissance. Les différentes composantes de cette matrice sont données par la relation suivante :

$$\forall\,\alpha,\beta=1,...,N_s:\quad h^{\alpha\beta}=a^{\alpha\beta}h_0\left(1+\frac{h_0\Gamma}{\tau_0 n}\right)^{n_e-1} \tag{1.20}$$

où :

- h_0 est le module d'écrouissage initial,
- τ_0 est la cission critique initiale,
- n_e est l'exposent de la loi d'écrouissage,
- $\mathbf{a}$ est une matrice d'interaction traduisant l'écrouissage latent suivant la géométrie des plan et direction de glissement. En effet, pour un système de glissement donné, la contribution des autres systèmes à l'augmentation de sa cission critique n'est pas uniformément repartie. Elle varie suivant le fait que les directions de glissement de ses homologues soient colinéaires, coplanaires ou quelconques par rapport à sa propre direction de glissement. L'expression détaillée de la matrice $\mathbf{a}$ est donnée dans l'Annexe A. Lorsque toutes les composantes de la matrice $\mathbf{a}$ valent 1, on retrouve l'expression d'un écrouissage isotrope largement utilisée dans la

littérature pour modéliser le comportement des matériaux à structure cubique (Inal et al., 2005 ; Signorelli et al., 2009 ; Yoshida et Kuroda, 2012 ; Tadano et al., 2013),

- Γ est le glissement cumulé. Ce dernier est relié aux différentes vitesses de glissement par la relation suivante :

$$\Gamma = \sum_{\alpha=1}^{2N_s} \int_0^t \dot{\gamma}^\alpha \, dt \tag{1.21}$$

La seconde matrice d'écrouissage utilisée dans ce travail permet de mieux décrire la physique du matériau en prenant en compte l'influence de l'organisation des dislocations sur l'évolution de la cission critique. Ses composantes s'expriment sous la forme suivante :

$$\forall \alpha,\beta = 1,...,N_s : \quad h^{\alpha\beta} = \frac{e_g \mu b}{2\sqrt{a^{\alpha k}\rho^k}} a^{\alpha\beta} \left(\frac{1}{D_{moy}} + \frac{\sqrt{\sum_{m\neq\beta} \rho^m}}{g_0} - 2y_c \rho^\beta \right) \quad ; \quad k = 1,...,N_s \tag{1.22}$$

où :

- e_g est une constante liée à la stabilité de configurations de dislocations. C'est la valeur qui minimise l'énergie libre de Gibbs sur une boucle de dislocation,
- μ est le module de cisaillement,
- b est la norme du vecteur de Burgers,
- $\mathbf{a}$ est la même matrice d'interaction utilisée dans l'équation (1.20),
- D_{moy} est la taille moyenne de grain. Dans le cas du monocristal, D_{moy} désignera la plus petite dimension du monocristal,
- g_0 est un paramètre de calage correspondant au stockage des dislocations,
- y_c est la distance d'annihilation critique de deux dislocations de signes opposés.

Les densités de dislocations évoluent selon la loi suivante :

$$\forall \alpha = 1,...,N_s : \quad \dot{\rho}^\alpha = \dot{\rho}^{\alpha+N_s} = \frac{1}{b} \left(\frac{1}{D_{moy}} + \frac{\sqrt{\sum_{m\neq\alpha} \rho^m}}{g_0} - 2y_c \rho^\alpha \right) \left(\dot{\gamma}^\alpha + \dot{\gamma}^{\alpha+N_s} \right) \tag{1.23}$$

Cette loi d'évolution tient compte du stockage et de l'annihilation des dislocations de signes contraires lorsque ces dernières atteignent une taille critique. Une description détaillée de cette matrice d'écrouissage peut être consultée dans les travaux de Kocks (1976), Francoisi (1984), Tabourot (1992) et Hoc (1999).

La détermination des vitesses de glissement des différents systèmes cristallographiques constitue le point central dans la modélisation du comportement du monocristal. En effet, une fois ces vitesses

déterminées, toutes les autres variables peuvent être aisément déduites. Pour ce faire, deux critères d'écoulement plastique sont utilisés : le critère classique de Schmid et l'une de ses formes régularisées.

1.2.3.1 Fonction de charge liée au critère classique de Schmid

Le critère classique de Schmid stipule que l'écoulement plastique sur un système de glissement α (se traduisant notamment par une vitesse de glissement strictement positive sur ce système) ne peut avoir lieu que si la cission résolue de ce système atteint sa cission critique :

$$\forall \alpha = 1,...,2N_s : \quad \begin{cases} X^\alpha = \tau^\alpha - \tau_c^\alpha \leq 0 \\ \dot{\gamma}^\alpha \geq 0 \\ \dot{\gamma}^\alpha X^\alpha = 0 \end{cases} \tag{1.24}$$

où X^α est la fonction de charge du système α associée à ce critère. On peut aisément remarquer que cette fonction de charge vérifie la loi de normalité introduite par Prager (1949). En effet, en utilisant les équations (1.9) et (1.24), on peut démontrer que l'équation $(1.8)_{(1)}$ est équivalente à :

$$\mathbf{d}^p = \dot{\gamma}^\alpha \frac{\partial X^\alpha}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \quad ; \quad \alpha = 1,...,2N_s \tag{1.25}$$

Le critère de Schmid est un critère multi-surface, et la fonction de charge globale f_c associée à ce critère est définie par :

$$f_c = \left(\mathrm{Max}_{\alpha=1,...,2N_s} X^\alpha \right) \leq 0 \tag{1.26}$$

Nous rappelons qu'en régime purement élastique, la fonction de charge f_c est strictement négative et en régime élastoplastique, elle est nulle. D'après l'équation (1.26), f_c ne peut être égale à zéro que s'il existe un sous-ensemble $\mathcal{P} \subset \{1,...,2N_s\}$ non vide, tel que :

$$\alpha \in \mathcal{P} \Leftrightarrow X^\alpha = 0 \tag{1.27}$$

Cet ensemble $\mathcal{P}$ est nommé l'ensemble des systèmes potentiels ou potentiellement actifs.

La relation (1.27) est une condition nécessaire au glissement. Cependant, elle n'est pas suffisante. En effet, pour qu'un système engendre un glissement sur son plan cristallographique, il faut que sa vitesse de glissement soit strictement positive. Ce système est alors dit actif. Nous désignerons par $\mathcal{A}$ l'ensemble de tous les systèmes actifs qui se définit mathématiquement comme suit :

$$\alpha \in \mathcal{A} \Leftrightarrow \dot{\gamma}^\alpha > 0 \tag{1.28}$$

On peut évidemment remarquer que $\mathcal{A}$ est inclus dans $\mathcal{P}$. Pour calculer les vitesses de glissement des éléments de $\mathcal{A}$, la relation de cohérence est utilisée. Celle-ci se traduit mathématiquement par l'équation suivante :

$$\forall \alpha \in \mathcal{A} : \quad \dot{X}^\alpha = 0 \tag{1.29}$$

En combinant les équations (1.17) et (1.18), l'équation (1.29) devient :

$$\forall \alpha \in \mathcal{A} : \quad \left(\mathbf{R}^{\alpha} : \mathbf{C} : \mathbf{R}^{\beta} + h^{\alpha\beta} \right) \dot{\gamma}^{\beta} = \mathbf{R}^{\alpha} : \left(\mathbf{C} : \mathbf{d} - \boldsymbol{\sigma}\, \mathrm{Tr}\left(\mathbf{d}\right) \right) \quad ; \quad \beta \in \mathcal{A} \tag{1.30}$$

L'expression analytique des vitesses de glissement peut être finalement déduite de l'équation (1.30) :

$$\forall \alpha \in \mathcal{A} : \quad \dot{\gamma}^{\alpha} = \left[M^{\alpha\beta} \mathbf{R}^{\beta} : \left(\mathbf{C} - \boldsymbol{\sigma} \otimes \mathbf{I}_2 \right) \right] : \mathbf{d} \quad ; \quad \beta \in \mathcal{A} \tag{1.31}$$

où $\mathbf{M}$ est l'inverse de la matrice $\mathbf{P}$ de dimension $\mathrm{Card}\left(\mathcal{A}\right)$ qui est définie par la forme indicielle suivante :

$$\forall \alpha, \beta \in \mathcal{A} : \quad P^{\alpha\beta} = \mathbf{R}^{\alpha} : \mathbf{C} : \mathbf{R}^{\beta} + h^{\alpha\beta} \tag{1.32}$$

Lorsque la matrice $\mathbf{P}$ n'est pas inversible, $\mathbf{M}$ est le pseudo-inverse de cette dernière. Ce cas de figure se produit lorsque l'état de contrainte se trouve sur un sommet dégénéré de la surface de charge (l'intersection d'au moins 6 plans de la surface de plasticité linéairement dépendants), entrainant ainsi une non-unicité de la normale à la surface en ce point. Ce problème est connu sous le nom d'ambigüité de la détermination des vitesses de glissement et l'utilisation du pseudo-inverse comme solution à ce problème a été proposée pour la première fois par Anand et Kothari (1996). Parmi les diverses solutions proposées dans la littérature, le choix du pseudo-inverse a été privilégié car il représente non seulement une astuce mathématique pour lever l'indétermination, mais il repose aussi sur des critères physiques. En effet, les vitesses de glissement calculées par le pseudo-inverse de $\mathbf{P}$ minimisent la somme des vitesses de glissement sur l'ensemble des valeurs possibles, au même titre que le critère de Taylor (Taylor, 1938). Une description du calcul de ce pseudo-inverse par la méthode de décomposition en valeurs singulières est détaillée dans l'Annexe A.

Par ailleurs, tous les autres systèmes cristallographiques n'appartenant pas à l'ensemble $\mathcal{A}$ ont une vitesse de glissement nulle.

1.2.3.2 Fonction de charge associée à une forme régularisée du critère de Schmid

La forme régularisée du critère de Schmid utilisée dans cette thèse découle des travaux de Gambin (Gambin, 1991 ; Gambin, 1992). Nous présentons une forme simplifiée de son approche, au même titre que celle utilisée dans Gambin et Barlat (1997). La fonction de charge globale f_c associée au critère régularisé de Schmid vérifie la relation suivante (Akpama et al., 2016b) :

$$f_c = \sum_{\alpha=1}^{2N_s} \left\langle \mathrm{sgn}\left(\tau^{\alpha}\right) \right\rangle \left(\frac{\tau^{\alpha}}{\tau_c^{\alpha}} \right)^{2n} - 1 \leq 0 \tag{1.33}$$

où :

- $\mathrm{sgn}\left(\tau^{\alpha}\right)$ désigne le signe de τ^{α},
- $\langle \ \rangle$ est un opérateur mathématique défini par la forme suivante :

$$\forall y \in \mathbb{R} : \quad \begin{cases} \langle y \rangle = y & \text{si} \quad y > 0 \\ \langle y \rangle = 0 & \text{si} \quad y \leq 0 \end{cases} \tag{1.34}$$

- n est un réel strictement positif, qui peut être considéré comme un paramètre d'arrondissement de la surface de charge f_c. L'influence de ce paramètre sur cette dernière sera analysée plus en détail dans la Section 1.5.2.

Contrairement à la loi classique de Schmid pour laquelle l'inversion d'une matrice est requise, en l'occurrence la matrice $\mathbf{P}$ définie par l'équation (1.32), les vitesses de glissement se calculent dans le cas présent de manière directe sous la forme générique suivante :

$$\forall \alpha = 1,...,2N_s : \quad \dot{\gamma}^\alpha = \dot{\lambda} \frac{\langle \text{sgn}(\tau^\alpha) \rangle}{\tau_c^\alpha} \left(\frac{\tau^\alpha}{\tau_c^\alpha} \right)^{2n-1} \tag{1.35}$$

où $\dot{\lambda}$ est un scalaire positif déduit de la loi de normalité. En effet, la loi de normalité stipule qu'il existe un réel positif $\dot{\omega}$ tel que :

$$\begin{aligned} \mathbf{d}^p &= \dot{\omega} \frac{\partial f_c}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = \dot{\omega} \frac{\partial f_c}{\partial \tau^\alpha} \frac{\partial \tau^\alpha}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \\ &= 2n\dot{\omega} \frac{\langle \text{sgn}(\tau^\alpha) \rangle}{\tau_c^\alpha} \left(\frac{\tau^\alpha}{\tau_c^\alpha} \right)^{2n-1} \mathbf{R}^\alpha \quad ; \quad \alpha = 1,...,2N_s \end{aligned} \tag{1.36}$$

En prenant $\dot{\lambda} = 2n\dot{\omega}$, on retrouve bien la relation $(1.8)_{(1)}$. Pour obtenir l'expression analytique de ce multiplicateur plastique, la relation de cohérence suivante est déterminée à partir de l'équation (1.33) :

$$\dot{f}_c = 2n \sum_{\alpha=1}^{2N_s} \langle \text{sgn}(\tau^\alpha) \rangle \left(\frac{\dot{\tau}^\alpha}{\tau^\alpha} - \frac{\dot{\tau}_c^\alpha}{\tau_c^\alpha} \right) \left(\frac{\tau^\alpha}{\tau_c^\alpha} \right)^{2n} = 0 \tag{1.37}$$

Par ailleurs, en utilisant les équations (1.17), (1.18) et (1.35), on obtient :

$$\begin{aligned} \forall \alpha = 1,...,2N_s : \quad \frac{\dot{\tau}^\alpha}{\tau^\alpha} - \frac{\dot{\tau}_c^\alpha}{\tau_c^\alpha} &= \frac{\mathbf{R}^\alpha : (\mathbf{C} - \boldsymbol{\sigma} \otimes \mathbf{I}_2) : \mathbf{d}}{\tau^\alpha} \\ &- \dot{\lambda} \sum_{\delta=1}^{2N_s} \frac{\langle \text{sgn}(\tau^\delta) \rangle}{\tau_c^\delta} \left(\frac{\tau^\delta}{\tau_c^\delta} \right)^{2n-1} \left(\frac{\mathbf{R}^\alpha : \mathbf{C} : \mathbf{R}^\delta}{\tau^\alpha} + \frac{h^{\alpha\delta}}{\tau_c^\delta} \right) \end{aligned} \tag{1.38}$$

En combinant les équations (1.37) et (1.38), l'expression analytique de $\dot{\lambda}$ s'obtient finalement sous la forme :

$$\dot{\lambda} = \frac{\mathcal{F} : \mathbf{d}}{x} \tag{1.39}$$

où $\mathcal{F}$ est un tenseur symétrique d'ordre 2 donnée par l'expression :

$$\mathcal{F} = \sum_{\alpha=1}^{2N_s} \langle \text{sgn}(\tau^\alpha) \rangle \left(\frac{\tau^\alpha}{\tau_c^\alpha} \right)^{2n} \frac{\mathbf{R}^\alpha : (\mathbf{C} - \boldsymbol{\sigma} \otimes \mathbf{I}_2)}{\tau^\alpha} \tag{1.40}$$

et x est une fonction scalaire donnée par la relation suivante :

$$x = \sum_{\alpha=1}^{2N_s}\sum_{\delta=1}^{2N_s} \frac{\left\langle \mathrm{sgn}\left(\tau^{\alpha}\right)\right\rangle \left\langle \mathrm{sgn}\left(\tau^{\delta}\right)\right\rangle}{\tau_c^{\delta}} \left(\frac{\tau^{\alpha}}{\tau_c^{\alpha}}\right)^{2n} \left(\frac{\tau^{\delta}}{\tau_c^{\delta}}\right)^{2n-1} \left(\frac{\mathbf{R}^{\alpha}:\mathbf{C}:\mathbf{R}^{\delta}}{\tau^{\alpha}} + \frac{h^{\alpha\delta}}{\tau_c^{\delta}}\right) \tag{1.41}$$

Une fois le multiplicateur $\dot{\lambda}$ calculé (à travers les équations (1.39)–(1.41)), la vitesse de chaque système de glissement peut être déterminée en utilisant la relation (1.35) :

$$\forall \alpha = 1,...,2N_s : \quad \dot{\gamma}^{\alpha} = \left[\frac{\left\langle \mathrm{sgn}\left(\tau^{\alpha}\right)\right\rangle}{\tau_c^{\alpha}} \left(\frac{\tau^{\alpha}}{\tau_c^{\alpha}}\right)^{2n-1} \frac{\mathcal{F}}{x}\right] : \mathbf{d} \tag{1.42}$$

La forme générique de l'équation (1.42) est assez similaire à celle utilisée dans le cas des modèles viscoplastiques sans seuil (Asaro et Needleman, 1985) où les vitesses de glissement sont définies par l'expression analytique suivante :

$$\forall \alpha = 1,...,2N_s : \quad \dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}^{0} \left(\frac{\tau^{\alpha}}{\tau_c^{\alpha}}\right)^{1/m} \tag{1.43}$$

où $\dot{\gamma}^{0}$ est une vitesse de référence traduisant un cisaillement uniforme sur tous les plans de glissement, et m est un paramètre de sensibilité à la vitesse. Une comparaison de la régularisation élastoplastique avec les formulations viscoplastiques montre que, similairement à ces dernières, les vitesses de glissement de tous les systèmes cristallographiques sont théoriquement non nulles (à l'exception bien sûr des systèmes dédoublés qui ont une cission résolue négative car le glissement ne peut se faire simultanément dans les deux sens) et déterminées de façon unique. Cependant, avec la formulation viscoplastique, il n'existe pas de "fonction de charge" tel qu'il soit possible de déduire l'expression du module tangent en appliquant simplement la relation de cohérence.

Par ailleurs, une comparaison entre la forme régularisée du critère de Schmid et sa forme classique montre que la notion d'activité de systèmes, introduite dans le cas de la forme classique du critère de Schmid (voir l'équation (1.31)), n'a aucune pertinence lorsque la loi régularisée est utilisée. Cependant, certains systèmes peuvent avoir des vitesses de glissement d'ordre de grandeur extrêmement élevé par rapport à d'autres systèmes. Ces systèmes pourraient être considérés comme jouant un rôle déterminant dans l'accommodation de la déformation plastique à l'échelle du monocristal, au même titre que les systèmes actifs lorsqu'on utilise la version classique du critère de Schmid. Une comparaison plus détaillée du critère de Schmid classique et de sa forme régularisée sera conduite dans la Section 1.5.2.

1.2.4 Module tangent microscopique

Dans le cadre des grandes déformations, plusieurs choix de modules tangents sont possibles. La formulation et la détermination de ces modules dépendent des mesures de contrainte et de déformation utilisées. Dans ce travail, nous avons choisi de déterminer le module tangent $\mathbf{l}$ qui permet de relier le taux de contrainte nominale $\dot{\mathbf{n}}$ au gradient de vitesse $\mathbf{g}$:

$$\dot{\mathbf{n}} = \mathbf{l} : \mathbf{g} \tag{1.44}$$

Nous rappelons que la contrainte nominale $\mathbf{n}$ est reliée à la contrainte de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ par la relation suivante :

$$\mathbf{n} = j\,\mathbf{f}^{-1}.\boldsymbol{\sigma} \tag{1.45}$$

où j est le Jacobien de la transformation décrite par $\mathbf{f}$.

Une différentiation de l'équation (1.45) permet d'exprimer le taux de contrainte nominale $\dot{\mathbf{n}}$ en fonction du taux de contrainte de Cauchy $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$:

$$\dot{\mathbf{n}} = j\,\mathbf{f}^{-1}.\left(\dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{Tr}\left(\mathbf{d}\right) - \mathbf{g}.\boldsymbol{\sigma}\right) \tag{1.46}$$

En choisissant la configuration déformée comme configuration de référence, le gradient de transformation $\mathbf{f}$ se réduit au tenseur identité $\mathbf{I}_2$. Par conséquent, l'équation (1.46) se réduit à la forme suivante :

$$\dot{\mathbf{n}} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{Tr}(\mathbf{d}) - \mathbf{g}.\boldsymbol{\sigma} \tag{1.47}$$

Le taux de contrainte de Cauchy $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$ est déterminé en combinant les équations (1.10) et (1.13) :

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C} : \mathbf{d} - \boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{Tr}\left(\mathbf{d}\right) + \left(\mathbf{w}.\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}.\mathbf{w}\right) - \dot{\gamma}^{\beta}\left(\mathbf{C} : \mathbf{R}^{\beta} + \mathbf{S}^{\beta}.\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}.\mathbf{S}^{\beta}\right) \quad ; \quad \beta = 1,...,2\,\mathrm{N_s}. \tag{1.48}$$

Ensuite, le taux de contrainte nominale $\dot{\mathbf{n}}$ est obtenu par insertion de l'expression (1.48) de $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$ dans (1.46) :

$$\dot{\mathbf{n}} = \mathbf{C} : \mathbf{d} - \mathbf{d}.\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}.\mathbf{w} - \dot{\gamma}^{\beta}\left(\mathbf{C} : \mathbf{R}^{\beta} + \mathbf{S}^{\beta}.\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}.\mathbf{S}^{\beta}\right) \quad ; \quad \beta = 1,...,2\,\mathrm{N_s}. \tag{1.49}$$

Le taux de contrainte nominale $\dot{\mathbf{n}}$ apparaît dans l'équation (1.49) comme une somme de quatre termes dont les trois premiers peuvent être chacun exprimés comme un produit doublement contracté de deux tenseurs indépendants : le premier étant un tenseur d'ordre 4 et le second le gradient de vitesse $\mathbf{g}$. En effet :

- Le tenseur d'élasticité $\mathbf{C}$ a la symétrie mineure, on en déduit que $\mathbf{C} : \mathbf{d} = \mathbf{C} : \mathbf{g}$.

$$\forall\, \mathrm{i,j} = 1,2,3 : \quad \left(\mathbf{d}.\boldsymbol{\sigma}\right)_{\mathrm{ij}} = \mathrm{d_{ip}}\sigma_{\mathrm{pj}} = \frac{1}{2}\left(\mathrm{g_{ip}} + \mathrm{g_{pi}}\right)\sigma_{\mathrm{pj}}$$

- $$= \frac{1}{2}\left(\delta_{\mathrm{ik}}\delta_{\mathrm{lp}} + \delta_{\mathrm{kp}}\delta_{\mathrm{il}}\right)\mathrm{g_{kl}}\sigma_{\mathrm{pj}} \tag{1.50}$$

$$= \frac{1}{2}\left(\delta_{\mathrm{ik}}\sigma_{\mathrm{jl}} + \sigma_{\mathrm{jk}}\delta_{\mathrm{il}}\right)\mathrm{g_{kl}} \qquad ; \qquad \mathrm{k,l,p} = 1,2,3$$

- $$\begin{aligned} \forall\, i,j=1,2,3: \quad (\boldsymbol{\sigma}.\mathbf{w})_{ij} &= \sigma_{ip} w_{pj} = \frac{1}{2}\left(g_{pj} - g_{jp}\right)\sigma_{ip} \\ &= \frac{1}{2}\left(\delta_{kp}\delta_{jl} - \delta_{jk}\delta_{lp}\right) g_{kl}\sigma_{ip} \\ &= \frac{1}{2}\left(\delta_{jl}\sigma_{ik} - \delta_{jk}\sigma_{il}\right) g_{kl} \qquad ; \qquad k,l,p=1,2,3 \end{aligned} \tag{1.51}$$

Le quatrième terme du second membre de l'équation (1.49) est fonction des vitesses de glissement qui sont elles-mêmes fonctions du gradient de vitesse. Leurs expressions diffèrent cependant selon la fonction de charge utilisée pour décrire l'écoulement plastique (voir les équations (1.31) et (1.42) pour plus de détails). Elles peuvent toutefois s'écrire sous la forme générique suivante :

$$\forall\, \alpha = 1,...,2N_s : \quad \dot{\gamma}^{\alpha} = \boldsymbol{Y}^{\alpha} : \mathbf{d} = \boldsymbol{Y}^{\alpha} : \mathbf{g} \tag{1.52}$$

en précisant que $\boldsymbol{Y}^{\alpha}$ est un tenseur d'ordre 2 symétrique. Lorsque le critère classique de Schmid est utilisé (voir la relation (1.31)), $\boldsymbol{Y}^{\alpha}$ est défini par les expressions suivantes :

$$\begin{aligned} &\forall\, \alpha \in \mathcal{A} : \quad \boldsymbol{Y}^{\alpha} = M^{\alpha\beta}\mathbf{R}^{\beta} : \left(\mathbf{C} - \boldsymbol{\sigma} \otimes \mathbf{I}_2\right) \quad ; \quad \beta \in \mathcal{A} \\ &\forall\, \alpha \notin \mathcal{A} : \quad \boldsymbol{Y}^{\alpha} = \mathbf{0} \end{aligned} \tag{1.53}$$

Lorsque la forme régularisée du critère de Schmid est utilisée (voir l'équation (1.42)), on obtient :

$$\forall\, \alpha = 1,...,2N_s : \quad \boldsymbol{Y}^{\alpha} = \frac{\left\langle \operatorname{sgn}\left(\tau^{\alpha}\right)\right\rangle}{\tau_c^{\alpha}} \left(\frac{\tau^{\alpha}}{\tau_c^{\alpha}}\right)^{2n-1} \frac{\mathcal{F}}{x} \tag{1.54}$$

Grâce aux relations (1.49)–(1.52), le module tangent $\mathbf{l}$, introduit dans l'équation (1.44), s'exprime finalement par l'expression suivante :

$$\mathbf{l} = \mathbf{C} - {}^{1}_{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{l} - {}^{2}_{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{l} - \left(\mathbf{C} : \mathbf{R}^{\beta} + \mathbf{S}^{\beta}.\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}.\mathbf{S}^{\beta}\right) \otimes \boldsymbol{Y}^{\beta} \quad ; \quad \beta = 1,...,2N_s \tag{1.55}$$

où ${}^{1}_{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{l}$ et ${}^{2}_{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{l}$ sont deux tenseurs d'ordre 4 vérifiant respectivement les relations suivantes :

$$\forall\, i,j,k,l=1,2,3: \quad {}^{1}_{\boldsymbol{\sigma}}l_{ijkl} = \frac{1}{2}\left(\delta_{ik}\sigma_{jl} + \sigma_{jk}\delta_{il}\right) \quad ; \quad {}^{2}_{\boldsymbol{\sigma}}l_{ijkl} = \frac{1}{2}\left(\delta_{jl}\sigma_{ik} - \delta_{jk}\sigma_{il}\right) \tag{1.56}$$

1.3 Intégration numérique des équations constitutives du monocristal

Cette section traite de l'intégration numérique des relations constitutives du monocristal développées dans la Section 1.2. Dû au caractère fortement non linéaire de ces relations, une intégration incrémentale s'impose. Ainsi, la déformation totale est discrétisée en plusieurs pas de temps et deux types d'algorithmes sont développés pour calculer principalement les vitesses de glissement accommodant la déformation élastoplastique entre deux instants voisins. Ces deux instants seront notés respectivement t_i et t_f où t_f vaut $t_i + \Delta t$, Δt étant le pas de temps qui les sépare. Ceux-ci sont utilisés comme référents à deux configurations déformées voisines notées respectivement Ω_{t_i} et Ω_{t_f}.

Dans la suite de cette section, les différentes variables seront indicées par t_i et t_f (à l'exception des cissions critiques et résolues pour lesquelles t_i et t_f seront placés en argument) afin de différencier leurs appartenances respectives aux différentes configurations Ω_{t_i} et Ω_{t_f}. Rappelons que par cohérence avec les équations de la cinématique discrète du monocristal, qui ont été exprimées dans la configuration déformée (voir la Section 1.2.2), une approche de type lagrangien actualisé a été utilisée pour formuler les équations constitutives. Ainsi, pour intégrer ces équations constitutives sur l'intervalle $I^{\Delta} = [t_i, t_f]$, Ω_{t_i} est choisie comme configuration de référence. Pour cet objectif, nous supposons que les grandeurs mécaniques suivantes sont connues à l'instant t_i : le gradient de transformation $\mathbf{f}$, l'orientation du réseau cristallin $\mathbf{r}$, la contrainte de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$, les parties symétrique et antisymétrique des tenseurs d'orientation de Schmid $\mathbf{R}^{\alpha}$ et $\mathbf{S}^{\alpha}$, les glissements cumulés γ^{α}, les densités de dislocation ρ^{α} et les cissions critiques τ_c^{α} ($\forall\, \alpha = 1,...,2\,N_s$). Le gradient de vitesse $\mathbf{g}$ est supposé constant et connu sur tout l'intervalle I^{Δ}. Le but des deux algorithmes proposés est de calculer ces différentes variables dans la configuration finale Ω_{t_f} en utilisant une méthode d'intégration explicite.

Le gradient de transformation $\mathbf{f}_{t_f}$ ne dépend que du gradient de vitesse $\mathbf{g}$ et est actualisé suivant l'approximation suivante :

$$\mathbf{f}_{t_f} = \left(\mathbf{I}_2 + \Delta t\,\mathbf{g}\right).\mathbf{f}_{t_i} \tag{1.57}$$

En considérant la relation $(1.5)_{(4)}$ décrivant la loi d'évolution de la matrice de rotation $\mathbf{r}$, on peut approcher $\mathbf{r}_{t_f}$ par la relation suivante :

$$\mathbf{r}_{t_f} = \mathbf{r}_{\Delta t}.\mathbf{r}_{t_i} = \mathbf{exp}\left(\Delta t\left(\mathbf{w} - \dot{\gamma}^{\beta}_{t_i}\,\mathbf{S}^{\beta}_{t_i}\right)\right).\mathbf{r}_{t_i} \quad ; \quad \beta = 1,...,2\,N_s \tag{1.58}$$

où $\mathbf{exp}$ désigne la fonction exponentielle d'une matrice carrée et $\mathbf{r}_{\Delta t}$ l'incrément de rotation entre les deux configurations Ω_{t_i} et Ω_{t_f}. Le calcul de cette fonction exponentielle sera détaillé dans l'Annexe A.

Les parties symétrique et antisymétrique des tenseurs d'orientation de Schmid $\mathbf{R}^{\alpha}_{t_f}$ et $\mathbf{S}^{\alpha}_{t_f}$ sont déterminées en fonction de leurs homologues $\mathbf{R}^{\alpha}_{t_i}$ et $\mathbf{S}^{\alpha}_{t_i}$ par les relations de transport suivantes :

$$\forall\, \alpha = 1,...,2\,N_s : \quad \begin{cases} \mathbf{R}^{\alpha}_{t_f} = \mathbf{r}_{\Delta t}.\mathbf{R}^{\alpha}_{t_i}.\mathbf{r}^{T}_{\Delta t} \\ \mathbf{S}^{\alpha}_{t_f} = \mathbf{r}_{\Delta t}.\mathbf{S}^{\alpha}_{t_i}.\mathbf{r}^{T}_{\Delta t} \end{cases} \tag{1.59}$$

L'actualisation de la contrainte de Cauchy à la fin du pas de temps doit permettre la continuité des cissions résolues des différents systèmes de glissement. Autrement dit, d'après l'équation (1.9), $\boldsymbol{\sigma}_{t_f}$ vérifie la relation

$$\forall\, \alpha = 1,...,2\,N_s : \quad \tau^{\alpha}\left(t_f\right) = \vec{\mathbf{m}}^{\alpha}_{t_f}.\boldsymbol{\sigma}_{t_f}.\vec{\mathbf{n}}^{\alpha}_{t_f} = \tau^{\alpha}\left(t_i\right) + \Delta t\,\dot{\tau}^{\alpha}\left(t_i\right) \tag{1.60}$$

Par ailleurs, grâce aux relations (1.9) et (1.16), l'expression de $\tau^{\alpha}(t_f)$ dans l'équation (1.60) peut être réécrite sous la forme suivante :

$$\forall\, \alpha = 1,...,2\,N_s : \quad \tau^{\alpha}\left(t_f\right) = \vec{\mathbf{m}}^{\alpha}_{t_i}.\left(\boldsymbol{\sigma}_{t_i} + \Delta t\,\boldsymbol{\sigma}^{\nabla}_{t_i}\right).\vec{\mathbf{n}}^{\alpha}_{t_i} \tag{1.61}$$

En utilisant les relations (1.7) et (1.58), on démontre sans difficulté que les vecteurs $\vec{\mathbf{m}}^{\alpha}_{t_i}$ et $\vec{\mathbf{n}}^{\alpha}_{t_i}$ dans la configuration Ω_{t_i} peuvent être exprimés en fonction de leur homologues $\vec{\mathbf{m}}^{\alpha}_{t_f}$ et $\vec{\mathbf{n}}^{\alpha}_{t_f}$ dans la configuration Ω_{t_f} par les équations suivantes :

$$\forall\, \alpha = 1,...,2\,N_s : \quad \begin{cases} \vec{\mathbf{m}}^{\alpha}_{t_i} = \mathbf{r}^{T}_{\Delta t}.\vec{\mathbf{m}}^{\alpha}_{t_f} \\ \vec{\mathbf{n}}^{\alpha}_{t_i} = \mathbf{r}^{T}_{\Delta t}.\vec{\mathbf{n}}^{\alpha}_{t_f} \end{cases} \tag{1.62}$$

En insérant les relations (1.62) dans l'équation (1.61), on obtient finalement la relation suivante :

$$\forall\, \alpha = 1,...,2\,N_s : \quad \tau^{\alpha}\left(t_f\right) = \vec{\mathbf{m}}^{\alpha}_{t_f}.\left[\mathbf{r}_{\Delta t}.\left(\boldsymbol{\sigma}_{t_i} + \Delta t\,\boldsymbol{\sigma}^{\nabla}_{t_i}\right).\mathbf{r}^{T}_{\Delta t}\right].\vec{\mathbf{n}}^{\alpha}_{t_f} \tag{1.63}$$

En comparant les relations (1.60) et (1.63), on en déduit que la contrainte de Cauchy à l'instant t_f vérifie la relation suivante :

$$\boldsymbol{\sigma}_{t_f} = \mathbf{r}_{\Delta t}.\left(\boldsymbol{\sigma}_{t_i} + \Delta t\,\boldsymbol{\sigma}^{\nabla}_{t_i}\right).\mathbf{r}^{T}_{\Delta t} \tag{1.64}$$

Nous rappelons l'expression de la dérivée co-rotationnelle de la contrainte de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}^{\nabla}_{t_i}$ en fonction des vitesses de glissement calculées à l'instant t_i (voir l'équation (1.10)) :

$$\boldsymbol{\sigma}^{\nabla}_{t_i} = \mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{d} - \boldsymbol{\sigma}_{t_i}\,\mathrm{Tr}\left(\mathbf{d}\right) - \dot{\gamma}^{\beta}\,\mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{R}^{\beta}_{t_i} \quad ; \quad \beta = 1,...,2\,N_s \tag{1.65}$$

où $\mathbf{C}_{t_i}$ est le tenseur des modules élastiques exprimé dans la configuration de référence Ω_{t_i}. La mise à jour de la contrainte de Cauchy s'obtient finalement via la relation :

$$\boldsymbol{\sigma}_{t_f} = \mathbf{r}_{\Delta t}.\left[\boldsymbol{\sigma}_{t_i} + \Delta t\left(\mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{d} - \boldsymbol{\sigma}_{t_i}\,\mathrm{Tr}\left(\mathbf{d}\right) - \dot{\gamma}^{\beta}_{t_i}\,\mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{R}^{\beta}_{t_i}\right)\right].\mathbf{r}^{T}_{\Delta t} \quad ; \quad \beta = 1,...,2\,N_s\,. \tag{1.66}$$

Cette relation peut être interprétée comme une actualisation de la contrainte dans la configuration de référence Ω_{t_i} (en utilisant la dérivée co-rotationnelle comme dérivée objective de contrainte), suivie d'un transport dans la configuration finale Ω_{t_f}.

Par ailleurs, similairement à l'expression de la cission résolue dans l'équation (1.60), le glissement cumulé sur chaque système de glissement est mis à jour à l'instant final t_f par un développement de Taylor à l'ordre 1 :

$$\forall\, \alpha = 1,...,2\,N_s : \quad \gamma^{\alpha}_{t_f} = \gamma^{\alpha}_{t_i} + \Delta t\,\dot{\gamma}^{\alpha}_{t_i} \tag{1.67}$$

Il en est de même pour les densités de dislocations dont la loi d'évolution est donnée par la relation (1.23) :

$$\forall\, \alpha = 1,\ldots,N_s : \quad \rho^{\alpha}_{t_f} = \rho^{\alpha+N_s}_{t_f} = \rho^{\alpha}_{t_i} + \frac{\Delta t}{b}\left(\frac{1}{D_{moy}} + \frac{\sqrt{\sum_{m\neq\alpha}\rho^{m}_{t_i}}}{g_0} - 2\, y_c\, \rho^{\alpha}_{t_i}\right)\left(\dot{\gamma}^{\alpha}_{t_i} + \dot{\gamma}^{\alpha+N_s}_{t_i}\right) \tag{1.68}$$

Les cissions critiques sont actualisées en intégrant l'équation (1.18) par un schéma explicite :

$$\forall\, \alpha = 1,\ldots,2\,N_s : \quad \tau^{\alpha}_{c}\left(t_f\right) = \tau^{\alpha}_{c}\left(t_i\right) + \Delta t\, \dot{\tau}^{\alpha}_{c}\left(t_i\right) = \tau^{\alpha}_{c}\left(t_i\right) + \Delta t\, h^{\alpha\beta}_{t_i}\, \dot{\gamma}^{\beta}_{t_i} \quad ; \quad \beta = 1,\ldots,2\,N_s \tag{1.69}$$

Nous rappelons que les deux différents types de matrice d'écrouissage $\mathbf{h}$ utilisés dans ce manuscrit sont définis par les relations (1.20) et (1.22).

Comme on peut le constater, toutes les variables calculées à l'instant final t_f dépendent explicitement des vitesses de glissement qui sont *a priori* inconnues. Le calcul numérique de ces vitesses fera l'objet des sections suivantes. Ce calcul est intrinsèquement lié à la fonction de charge utilisée (voir les Sections 1.2.3.1 et 1.2.3.2). Suivant les deux fonctions de charge utilisées, en l'occurrence celle liée au critère de Schmid et celle liée à sa forme régularisée, deux types d'algorithmes seront proposés : un algorithme de retour radial basé sur une prédiction élastique suivie d'une correction plastique (Cuitino et Ortiz, 1992 ; Anand et Kothari, 1996 ; Sawisch et al., 1996 ; Akpama et al., 2016a), et un algorithme dit "évolutif" basé sur une prédiction élastoplastique et une détermination du pas de temps sur lequel cette prédiction élastoplastique reste valide (Borja et Wren, 1993 ; Lipinski, 1993 ; Ben Bettaieb et al., 2012 ; Yoshida et Kuroda, 2012 ; Akpama et al., 2016a).

1.3.1 Critère classique de Schmid

Les vitesses de glissement doivent satisfaire de manière incrémentale la relation (1.24) tout au long de la déformation. Ainsi en considérant l'incrément de temps $I^{\Delta} = \left[t_i, t_f\right]$, nous supposons que le critère (1.24) est satisfait à l'instant initial t_i et nous calculons les vitesses de glissement ($\dot{\gamma}^{\beta}_{t_i}$; $\beta = 1,\ldots,2\,N_s$) pour que cette relation reste satisfaite à l'instant final t_f. Pour ce faire, nous utilisons la notion d'ensemble de systèmes potentiellement actifs $\mathcal{P}$, introduite dans la relation (1.27). Cette définition est intrinsèquement liée à la description de l'écoulement plastique par le critère de Schmid. De manière générale, l'ensemble $\mathcal{P}$ est constitué de tous les systèmes de glissement susceptibles d'avoir une vitesse de glissement non nulle. Cependant, sa définition mathématique diffère selon le type d'algorithme utilisé. Dans tous les cas de figure, cet ensemble est fonction des cissions résolues et critiques des systèmes de glissement.

1.3.1.1 Algorithme de retour radial

Cet algorithme de type prédiction élastique et correction plastique est basé sur trois principales étapes qui seront détaillées dans les Sections 1.3.1.1.1, 1.3.1.1.2 et 1.3.1.1.3.

1.3.1.1.1 *Détermination de l'ensemble des systèmes potentiellement actifs*

Les vitesses de glissement doivent être déterminées pour les systèmes potentiellement actifs. Naturellement les autres systèmes ont des vitesses de glissement nulles sur le pas de temps I^{Δ}. Par conséquent, pour déterminer les vitesses de glissement il faut d'abord déterminer l'ensemble des systèmes potentiellement actifs. Afin de déterminer cet ensemble, nous introduisons la notion de cission résolue "trial" d'un système α, qui sera notée τ_{tr}^{α}. Cette cission est définie comme étant la cission résolue du système α à l'instant final t_f lorsqu'on suppose que la déformation du monocristal sur I^{Δ} est purement élastique. Elle est déterminée par la relation suivante :

$$\begin{aligned} \forall\, \alpha = 1,\dots,2\,N_s : \quad \tau_{tr}^{\alpha}\left(t_f\right) &= \mathbf{R}_{t_f}^{\alpha\,tr} : \boldsymbol{\sigma}_{t_f}^{tr} \\ &= \left(\mathbf{r}_{\Delta t}^{tr}.\mathbf{R}_{t_i}^{\alpha\,tr}.\left(\mathbf{r}_{\Delta t}^{tr}\right)^T\right) : \left[\mathbf{r}_{\Delta t}^{tr}.\left(\boldsymbol{\sigma}_{t_i} + \Delta t\left(\mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{d} - \boldsymbol{\sigma}_{t_i}\mathrm{Tr}\left(\mathbf{d}\right)\right)\right).\left(\mathbf{r}_{\Delta t}^{tr}\right)^T\right] \end{aligned} \tag{1.70}$$

avec $\mathbf{r}_{\Delta t}^{tr} = \mathbf{exp}\left(\Delta t\,\mathbf{w}\right)$. Il faut remarquer que les expressions de $\mathbf{r}_{\Delta t}^{tr}$ et $\boldsymbol{\sigma}_{t_f}^{tr}$ sont similaires à celles de $\mathbf{r}_{\Delta t}$ et $\boldsymbol{\sigma}_{t_f}$, définies respectivement par les relations (1.58) et (1.66), dans lesquelles on suppose que les vitesses de glissement de tous les systèmes sont nulles.

Les systèmes potentiellement actifs sont ceux dont la cission résolue "trial" est supérieure à la cission critique au début du pas de temps :

$$\mathcal{P} = \left\{\alpha = 1,\dots,2N_s : \quad \tau_{tr}^{\alpha}\left(t_f\right) - \tau_c^{\alpha}\left(t_i\right) > 0\right\} \tag{1.71}$$

Suivant la valeur de $\mathrm{Card}\left(\mathcal{P}\right)$, deux possibilités sont envisageables pour la nature du comportement mécanique sur le pas de temps courant :

- Si $\mathrm{Card}\left(\mathcal{P}\right) = 0$ (c'est-à-dire $\mathcal{P} = \varnothing$), l'hypothèse de comportement purement élastique est vérifiée. Toutes les vitesses de glissement sont donc effectivement nulles et l'algorithme décrit dans la Section 1.3.1.1.2 est ignorée.
- Si $\mathrm{Card}\left(\mathcal{P}\right) > 0$ (c'est-à-dire $\mathcal{P} \neq \varnothing$), alors il y a écoulement plastique et donc une correction plastique de la prédiction élastique est requise. Pour déterminer les systèmes actifs ainsi que leurs vitesses de glissement, l'algorithme détaillé dans la Section 1.3.1.1.2 est exécuté.

1.3.1.1.2 *Détermination des vitesses de glissement des systèmes potentiellement actifs*

Les valeurs des différentes vitesses de glissement calculées à l'instant initial t_i sont régies par le critère de Schmid évoqué dans la relation (1.24). Ce critère peut être réécrit sous la forme incrémentale suivante :

$$\forall\, \alpha \in \mathcal{P} : \quad \begin{cases} X_{t_f}^{\alpha} = \tau^{\alpha}\left(t_f\right) - \tau_c^{\alpha}\left(t_f\right) \leq 0 \\ \dot{\gamma}_{t_i}^{\alpha} \geq 0 \\ \dot{\gamma}_{t_i}^{\alpha} X_{t_f}^{\alpha} = 0 \end{cases} \tag{1.72}$$

où la cission résolue $\tau^{\alpha}\left(t_f\right)$ peut être exprimée en fonction des vitesses de glissement. En effet, en utilisant les relations (1.61) et (1.65), on obtient :

$$\forall\, \alpha = 1,\ldots,2\,N_s : \quad \tau^{\alpha}\left(t_f\right) = \mathbf{R}^{\alpha}_{t_i} : \left[\boldsymbol{\sigma}_{t_i} + \Delta t\left(\mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{d} - \boldsymbol{\sigma}_{t_i}\mathrm{Tr}\left(\mathbf{d}\right) - \dot{\gamma}^{\beta}_{t_i}\,\mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{R}^{\beta}_{t_i}\right)\right] \quad ; \quad \beta = 1,\ldots,2\,N_s \tag{1.73}$$

Par ailleurs, l'expression de la cission critique $\tau^{\alpha}_{c}\left(t_f\right)$ utilisée dans la relation (1.72) est la même que celle introduite dans l'équation (1.69).

Le système (1.72) est un système de complémentarité linéaire qui peut être reformulé d'une manière équivalente en un système non linéaire simple, grâce aux fonctions de Fischer–Burmeister :

$$\forall\, \alpha \in \mathcal{P} : \quad \varphi^{\alpha}_{t_f} = \sqrt{\left(X^{\alpha}_{t_f}\right)^2 + \left(\Delta t\,\dot{\gamma}^{\alpha}_{t_i}\right)^2} + X^{\alpha}_{t_f} - \Delta t\,\dot{\gamma}^{\alpha}_{t_i} = 0 \tag{1.74}$$

Cette approche fut appliquée au calcul des vitesses de glissement par Schmidt–Baldassari (2003).

Le système (1.74) peut être résolu par une méthode itérative de type Newton–Raphson. La matrice jacobienne $\mathbf{J}$ de ce système est définie par la forme indicielle suivante :

$$\forall\, \alpha,\beta \in \mathcal{P}: \quad J^{\alpha\beta} = \Delta t\left(\frac{\Delta t\,\dot{\gamma}^{\alpha}_{t_i}}{\sqrt{\left(X^{\alpha}_{t_f}\right)^2 + \left(\Delta t\,\dot{\gamma}^{\alpha}_{t_i}\right)^2}} - 1\right)\delta_{\alpha\beta} - \Delta t\left(\frac{X^{\alpha}_{t_f}}{\sqrt{\left(X^{\alpha}_{t_f}\right)^2 + \left(\Delta t\,\dot{\gamma}^{\alpha}_{t_i}\right)^2}} + 1\right)P^{\alpha\beta}_{t_i} \tag{1.75}$$

où $P^{\alpha\beta}_{t_i}$ est la valeur à l'instant t_i de la composante (α,β) de la matrice $\mathbf{P}$ introduite dans l'équation (1.32). Les différentes étapes du calcul itératif des vitesses de glissement se décrivent comme suit :

- ✓ Étape 0 : Avant la première itération ($k = 0$), les vitesses de glissement des différents systèmes sont initialisées à leur valeurs antérieures calculées à l'incrément précédent. Il faut préciser que lorsque l'incrément courant marque le passage de la phase purement élastique à la phase élastoplastique, toutes les vitesses de glissement ont initialement une valeur nulle.
- ✓ Étape 1 : À l'itération courante $k\,(k > 0)$, on calcule la norme euclidienne du vecteur résidu à l'itération courante. Ce vecteur résidu que nous noterons $\boldsymbol{\varphi}^{(k)}_{t_f}$ est de dimension $\mathrm{Card}\left(\mathcal{P}\right)$ et a pour composantes les valeurs de $\varphi^{\alpha\,(k)}_{t_f}\,(\alpha \in \mathcal{P})$ introduites dans l'équation (1.74).
  - Si $\left\|\boldsymbol{\varphi}^{(k)}_{t_f}\right\| < 10^{-5}$ alors le calcul itératif converge et les vitesses de glissement $\dot{\gamma}^{\alpha\,(k)}_{t_i}$ correspondant à l'itération k sont la solution du problème (1.74). On passe alors à l'Étape 2.
  - Si $\left\|\boldsymbol{\varphi}^{(k)}_{t_f}\right\| \geq 10^{-5}$ alors on calcule la matrice jacobienne $\mathbf{J}^{(k)}$ du système en utilisant la relation (1.75) et on actualise les vitesses de glissement pour une réexécution de l'Étape 1 à l'itération suivante :

$$\forall \alpha \in \mathcal{P} : \quad \dot{\gamma}^{\alpha\,(k+1)}_{t_i} = \dot{\gamma}^{\alpha\,(k)}_{t_i} - K^{\alpha\beta\,(k)}\,\varphi^{\beta\,(k)}_{t_f} \quad ; \quad \beta \in \mathcal{P} \tag{1.76}$$

où la matrice $\mathbf{K}^{(k)}$ est l'inverse de $\mathbf{J}^{(k)}$.

- ✓ Étape 2 : À cette étape, la solution du système (1.74) est connue. Par suite, les différentes variables caractérisant l'état mécanique du monocristal sont mises à jour en utilisant les équations (1.57)–(1.59), (1.66)–(1.69).

Il est possible que la méthode de détermination itérative des vitesses de glissement détaillée dans l'Étape 1 ne converge pas toujours. Cela est typiquement le cas lorsque la dimension du système (qui est égale à $\mathrm{Card}(\mathcal{P})$) dépasse largement le nombre de systèmes réellement actifs. Dans ce cas, on divise le pas de temps par deux après 10 itérations sans convergence afin de réduire le nombre de systèmes potentiellement actifs, puis on recommence le calcul à partir de l'algorithme décrit dans la Section 1.3.1.1.1.

À la fin du pas de temps imposé, tous les systèmes actifs vérifient naturellement la relation :

$$\forall \alpha \in \mathcal{A} : \quad \tau^{\alpha}\left(t_f\right) = \tau_c^{\alpha}\left(t_f\right) \tag{1.77}$$

Il faut noter cependant que, contrairement à l'algorithme évolutif que nous aborderons dans la Section 1.3.1.2, ces systèmes ne vérifient pas forcément la condition $\tau^{\alpha}\left(t_i\right) = \tau_c^{\alpha}\left(t_i\right)$.

Par ailleurs, nous remarquons que la procédure détaillée dans la Section 1.3.1.1.2 permet de déterminer simultanément l'ensemble des systèmes actifs et les vitesses de glissement correspondantes. En effet, grâce à l'utilisation des fonctions de Fischer–Burmeister, la possibilité d'obtenir à la convergence des valeurs négatives pour les vitesses de glissement est exclue. Il n'en est pas de même pour l'algorithme évolutif que nous présenterons. Il est toutefois possible de dissocier la détermination des systèmes actifs de celle de leurs vitesses de glissement en mettant en place deux boucles imbriquées : une boucle externe dédiée à la recherche itérative de l'ensemble $\mathcal{A}$ dans laquelle est imbriquée une autre permettant le calcul des vitesses de glissement à travers une relation de cohérence beaucoup plus simple que celle utilisée dans la relation (1.74) :

$$\forall \alpha \in \mathcal{P} : \quad X_{t_f}^{\alpha} = 0 \tag{1.78}$$

On peut aisément vérifier que la matrice jacobienne du système d'équations (1.78) est tout simplement égale à $-\Delta t\,\mathbf{P}$. Cependant, la résolution du système (1.78) peut conduire à des vitesses de glissement négatives à la convergence. Plus de détails sur cette méthode de détermination de $\mathcal{A}$ et des vitesses de glissement correspondantes (par deux sous-étapes distinctes) sont donnés dans la Section 1.3.1.2.3.

1.3.1.2 Algorithme évolutif

Le principe de cet algorithme repose sur une prédiction élastoplastique du comportement du monocristal, suivie d'une détermination du sous-pas de temps sur lequel cette prédiction reste valide. Ainsi, le pas de temps imposé $I^{\Delta} = \left[t_i, t_f\right]$ est subdivisé en plusieurs sous-pas de temps $I^{\delta_1} = \left[t_0, t_1\right], I^{\delta_2} = \left[t_1, t_2\right], \ldots, I^{\delta_n} = \left[t_{n-1}, t_n\right]$ (avec $t_0 = t_i$ et $t_n = t_f$), où chaque subdivision marque le

changement de l'activité des systèmes (l'addition de nouveaux systèmes ou la suppression de systèmes existants). Le terme "évolutif " a été choisi en référence au caractère variable de l'activité des systèmes sur le pas de temps imposé. Cet algorithme est défini par les trois étapes décrites dans les sections suivantes.

1.3.1.2.1 *Détermination de l'ensemble des systèmes potentiellement actifs*

À la différence de l'algorithme de retour radial (Section 1.3.1.1), l'ensemble des systèmes potentiellement actifs est déterminé au début du pas de temps t_i dans le présent algorithme :

$$\mathcal{P} = \left\{ \alpha = 1,...,2N_s : \quad \tau^\alpha\left(t_i\right) - \tau_c^\alpha\left(t_i\right) = 0 \right\} \tag{1.79}$$

où la cission résolue du système α à l'instant t_i vaut $\mathbf{R}_{t_i}^\alpha : \boldsymbol{\sigma}_{t_i}$. Suivant la valeur de $\mathrm{Card}\left(\mathcal{P}\right)$, le choix suivant est appliqué :

- Si $\mathrm{Card}\left(\mathcal{P}\right) = 0$ ($\mathcal{P} = \varnothing$) ou $\mathrm{Card}\left(\mathcal{P}\right) \neq 0$ ($\mathcal{P} \neq \varnothing$) avec $\mathbf{R}_{t_i}^\alpha : \mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{d} \leq 0$ pour tout $\alpha \in \mathcal{P}$, le comportement du monocristal est purement élastique sur un sous-pas de temps I^δ dont la longueur sera déterminée par l'algorithme décrit dans la Section 1.3.1.2.2.
- Si $\mathcal{P} \neq \varnothing$ et qu'il existe au moins un système $\alpha \in \mathcal{P}$ tel que $\mathbf{R}_{t_i}^\alpha : \mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{d} > 0$ alors le comportement du monocristal est élastoplastique sur un sous-pas de temps I^δ à déterminer. Dans ce cas, l'algorithme détaillé dans la Section 1.3.1.2.3 est exécuté.

1.3.1.2.2 *Phase purement élastique du comportement du monocristal*

L'objectif de l'algorithme décrit dans cette section est de calculer le sous-pas de temps δt (inférieur ou égal au pas de temps imposé Δt) sur lequel le comportement du monocristal est entièrement élastique. C'est le pas de temps requis pour que le monocristal passe d'un régime purement élastique à un régime élastoplastique. Autrement dit, δt est défini tel qu'il existe un ensemble $\mathcal{E}_1$ de systèmes de glissement vérifiant :

$$\begin{aligned} &\forall \alpha \in \mathcal{E}_1 : \quad \tau^\alpha\left(t_i + \delta t\right) = \tau_c^\alpha\left(t_i\right) \\ &\forall \alpha \notin \mathcal{E}_1 : \quad \tau^\alpha\left(t_i + \delta t\right) < \tau_c^\alpha\left(t_i\right) \end{aligned} \tag{1.80}$$

avec :

$$\tau^\alpha\left(t_i + \delta t\right) = \mathbf{R}_{t_i}^\alpha : \left[\boldsymbol{\sigma}_{t_i} + \delta t\left(\mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{d} - \boldsymbol{\sigma}_{t_i} \mathrm{Tr}\left(\mathbf{d}\right)\right) \right] \tag{1.81}$$

Par ailleurs, nous pouvons remarquer que l'ensemble $\mathcal{E}_1$ peut être vide. Dans ce cas, δt est égal à Δt. Le sous-pas de temps δt vérifie donc la relation suivante :

$$\delta t = \min_{\alpha=1,...,2N_s} \left\{ \Delta t, \frac{\tau_c^\alpha\left(t_i\right) - \mathbf{R}_{t_i}^\alpha : \boldsymbol{\sigma}_{t_i}}{\mathbf{R}_{t_i}^\alpha : \left(\mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{d} - \boldsymbol{\sigma}_{t_i} \mathrm{Tr}\left(\mathbf{d}\right)\right)} \right\} \tag{1.82}$$

Une fois le sous-incrément de temps élastique I^{δ} déterminé, le tenseur d'orientation du réseau cristallographique $\mathbf{r}_{t_f}$ est actualisé à travers la relation :

$$\mathbf{r}_{t_f} = \mathbf{exp}\left(\Delta t\,\mathbf{w}\right).\mathbf{r}_{t_i} \tag{1.83}$$

Il en est de même pour la contrainte de Cauchy du monocristal qui est actualisée grâce à la relation suivante :

$$\boldsymbol{\sigma}_{t_f} = \mathbf{exp}\left(\Delta t\,\mathbf{w}\right).\left[\boldsymbol{\sigma}_{t_i} + \Delta t\left(\mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{d} - \boldsymbol{\sigma}_{t_i}\mathrm{Tr}\left(\mathbf{d}\right)\right)\right].\left(\mathbf{exp}\left(\Delta t\,\mathbf{w}\right)\right)^{T} \tag{1.84}$$

Toutes les autres variables restent inchangées. Il faut par ailleurs préciser que lorsque $\delta t < \Delta t$, il en résulte deux partitions du pas de temps initialement imposé I^{Δ}, dont la première correspond à δt et la seconde à $\Delta t - \delta t$. Cette dernière peut être considérée comme une actualisation de I^{Δ}. On a donc :

$$t_i \leftarrow t_i + \delta t \quad ; \quad \Delta t \leftarrow \Delta t - \delta t \quad ; \quad t_f \leftarrow t_i + \Delta t \quad ; \quad I^{\Delta} = \left[t_i, t_f\right] \tag{1.85}$$

et l'algorithme décrit dans la Section 1.3.1.2.1 est à nouveau exécuté. Si par contre $\delta t = \Delta t$, alors l'intégration sur le pas de temps imposé I^{Δ} est terminée.

1.3.1.2.3 <u>*Détermination des vitesses de glissement des systèmes potentiellement actifs*</u>

Pour chaque système de glissement appartenant à $\mathcal{P}$, le critère de Schmid doit être vérifié à l'instant final t_f d'un sous-pas de temps $I^{\delta} = \left[t_i, t_f\right]$ (du pas de temps actualisé I^{Δ}) qui est *a priori* inconnu et doit être déterminé. Dans le cas présent, l'équation (1.24) peut être exprimée d'une manière équivalente sous la forme suivante :

$$\forall \alpha \in \mathcal{P} : \begin{cases} \chi^{\alpha}_{t_i} = \mathbf{R}^{\alpha}_{t_i} : \left(\mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{d} - \boldsymbol{\sigma}_{t_i}\mathrm{Tr}\left(\mathbf{d}\right) - \dot{\gamma}^{\beta}_{t_i}\mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{R}^{\beta}_{t_i}\right) - h^{\alpha\beta}_{t_i}\dot{\gamma}^{\beta}_{t_i} \le 0 \\ \dot{\gamma}^{\alpha}_{t_i} \ge 0 \\ \dot{\gamma}^{\alpha}_{t_i}\,\chi^{\alpha}_{t_i} = 0 \end{cases} \quad ; \quad \beta \in \mathcal{P} \tag{1.86}$$

En effet, similairement aux équations (1.69) et (1.73), les cissions critiques et résolues des différents systèmes de glissement vérifient les relations suivantes :

$$\forall \alpha \in \mathcal{P} : \begin{cases} \tau^{\alpha}_{c}\left(t_f\right) = \tau^{\alpha}_{c}\left(t_i\right) + \delta t\, h^{\alpha\beta}_{t_i}\dot{\gamma}^{\beta}_{t_i} \\ \tau^{\alpha}\left(t_f\right) = \tau^{\alpha}\left(t_i\right) + \delta t\,\mathbf{R}^{\alpha}_{t_i} : \left(\mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{d} - \boldsymbol{\sigma}_{t_i}\mathrm{Tr}\left(\mathbf{d}\right) - \dot{\gamma}^{\beta}_{t_i}\mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{R}^{\beta}_{t_i}\right) \end{cases} \quad ; \quad \beta \in \mathcal{P} \tag{1.87}$$

Sachant que pour tout système potentiellement actif, les cission résolue et critique sont identiques à l'instant initial t_i (voir la relation (1.79)), on obtient l'équation $(1.86)_{(1)}$ en insérant les relations (1.87) dans l'équation $(1.72)_{(1)}$.

Nous rappelons que δt est le sous-pas de temps de Δt qui est *a priori* inconnu. L'équation (1.86) représente la relation de cohérence utilisée pour déterminer les vitesses de glissement des systèmes

potentiellement actifs et en déduire les systèmes effectivement actifs. Ces dernières sont calculées via un algorithme qui se décrit par les trois étapes suivantes :

- Étape 1 : L'équation (1.86) est réécrite de manière équivalente sous la forme :

$$\forall \alpha \in \mathcal{P} : \quad \chi_{t_i}^{\alpha} = b_{t_i}^{\alpha} - P_{t_i}^{\alpha\beta}\,\dot{\gamma}_{t_i}^{\beta} \leq 0 \quad ; \quad \dot{\gamma}_{t_i}^{\alpha} \geq 0 \quad ; \quad \dot{\gamma}_{t_i}^{\alpha}\chi_{t_i}^{\alpha} = 0 \quad ; \quad \beta \in \mathcal{P} \tag{1.88}$$

où $\mathbf{b}_{t_i}$ est un vecteur dont les composantes vérifient :

$$\forall \alpha \in \mathcal{P} : \quad b_{t_i}^{\alpha} = \mathbf{R}_{t_i}^{\alpha} : \left(\mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{d} - \boldsymbol{\sigma}_{t_i}\,\mathrm{Tr}\left(\mathbf{d}\right)\right) \tag{1.89}$$

Nous rappelons que $\mathbf{P}_{t_i}$ est la matrice carrée de dimension $\mathrm{Card}\left(\mathcal{P}\right)$ exprimée à l'instant initial t_i, dont les composantes sont données par l'équation (1.32). Bien qu'il soit possible de résoudre le système (1.88) par une reformulation basée sur les fonctions de Fischer–Burmeister comme ce fut le cas pour l'algorithme de retour radial, cette démarche n'est pas la méthode la plus optimale dans le cas présent. Une méthode alternative basée sur la recherche combinatoire de l'ensemble des systèmes actifs est utilisée pour résoudre ce problème de complémentarité linéaire. Elle est similaire à celle proposée dans (Akpama et al., 2016a) et se décompose en 3 sous-étapes :

- ✓ Étape 1.1 : L'ensemble des systèmes actifs $\mathcal{A}$ est initialement choisi comme étant égal à l'ensemble des systèmes potentiellement actifs $\mathcal{P}$. Par conséquent, les vitesses de glissement correspondantes sont supposées non nulles et sont déterminées par la résolution du système d'équations suivant :

$$\boldsymbol{\chi}_{t_i} = \mathbf{b}_{t_i} - \mathbf{P}_{t_i}\dot{\boldsymbol{\gamma}}_{t_i} = \mathbf{0} \Leftrightarrow \mathbf{P}_{t_i}\dot{\boldsymbol{\gamma}}_{t_i} = \mathbf{b}_{t_i} \tag{1.90}$$

  où $\dot{\boldsymbol{\gamma}}_{t_i}$ est un vecteur de dimension $\mathrm{Card}\left(\mathcal{A}\right)$ dont les composantes sont les vitesses de glissement des différents systèmes potentiellement actifs. La résolution du système (1.90) nécessite l'inversion de la matrice $\mathbf{P}_{t_i}$. Lorsque celle-ci est singulière, la méthode de pseudo-inversion est utilisée. Il faut noter que la procédure décrite dans cette étape est exécutée à plusieurs reprises si nécessaire. En effet, si toutes les composantes de $\dot{\boldsymbol{\gamma}}_{t_i}$ sont positives alors deux cas de figure sont possibles : s'il s'agit de la première itération, $\mathcal{A}$ est effectivement confondu avec $\mathcal{P}$ et la procédure décrite à l'Étape 2 est suivie. S'il s'agit d'une itération supérieure à 1, $\mathcal{A}$ est strictement inclus dans $\mathcal{P}$ et c'est la procédure décrite à l'Étape 1.3 qui est suivie. Si par contre il existe au moins un élément $\alpha \in \mathcal{P}$ ayant une vitesse négative ou nulle, alors d'autres itérations sont nécessaires pour déterminer l'ensemble $\mathcal{A}$. L'algorithme décrit à l'Étape 1.2 est alors exécuté.

- ✓ Étape 1.2 : À cette étape, il existe au moins un élément $\alpha \in \mathcal{A}$ tel que la vitesse de glissement correspondante $\dot{\gamma}_{t_i}^{\alpha}$ soit négative. Cela est incompatible avec la définition de

l'ensemble $\mathcal{A}$. Cette incompatibilité est résolue par une mise à jour de cet ensemble, qui consiste à y soustraire tous les éléments ayant des vitesses de glissement négatives. Une fois l'ensemble $\mathcal{A}$ actualisé, une nouvelle itération est requise pour exécuter à nouveau l'algorithme décrit à l'Étape 1.1.

- ✓ Étape 1.3 : Cette étape est dédiée à la vérification de la satisfaction de la condition de cohérence (voir l'équation (1.86)). Celle-ci est naturellement satisfaite pour tous les systèmes appartenant à $\mathcal{A}$. En effet, les vitesses de glissement des systèmes appartenant à $\mathcal{A}$ sont strictement positives et vérifient donc la condition $(1.86)_{(2)}$. En considérant l'équation (1.90) qui est une condition nécessaire au calcul des vitesses de glissement, on en déduit que les relations $(1.86)_{(1)}$ et $(1.86)_{(3)}$ sont satisfaites. Pour les systèmes potentiellement actifs mais non actifs ($\alpha \in \mathcal{P} \setminus \mathcal{A}$), les relations $(1.86)_{(2)}$ et $(1.86)_{(3)}$ sont automatiquement vérifiées puisque ces systèmes ont des vitesses de glissement nulles. Cependant, rien ne garantit que ces systèmes vérifient la relation $(1.86)_{(1)}$. Il existe peut-être des éléments de $\mathcal{P} \setminus \mathcal{A}$ dont la dérivée de la cission résolue est strictement supérieure à la dérivée de la cission critique. Dans ce cas de figure, l'ensemble $\mathcal{A}$ est mis à jour en y ajoutant ces éléments et l'algorithme décrit à l'Étape 1.1 est à nouveau exécuté dans une nouvelle itération. Si par contre la relation de cohérence (1.86) est satisfaite, alors l'ensemble des systèmes actifs $\mathcal{A}$ est complètement déterminé, de même que les vitesses de glissement associées aux éléments de cet ensemble. Dans ce cas on passe à l'Étape 2. Généralement il ne faut que quelques itérations pour converger sur la détermination de l'ensemble $\mathcal{A}$ en appliquant les Étapes 1.2 et 1.3. Cette méthode n'est cependant pas infaillible. Il est en effet tout à fait possible de se retrouver dans une configuration où les systèmes que l'on retranche à l'Étape 1.2 sont les mêmes que l'on rajoute à l'Étape 1.3, entraînant ainsi l'exécution d'une boucle infinie. Une méthode absolument fiable de détermination de $\mathcal{A}$ serait de tester systématiquement toutes les sous-combinaisons de $\mathcal{P}$ (Lipinski, 1993). Pour un ensemble $\mathcal{P}$ contenant n_{p} systèmes, le nombre de sous-combinaisons possibles de $\mathcal{P}$ est égal à $2^{n_{\mathrm{p}}}$. Par conséquent, l'application d'une recherche combinatoire systématique peut s'avérer très couteuse. À titre d'exemple, un ensemble des systèmes potentiellement actifs comprenant 8 éléments nécessiterait le calcul des vitesses de glissement de 256 sous-combinaisons possibles. La méthode itérative présentée aux Étapes 1.2 et 1.3 apparaît donc être un bon compromis entre robustesse et gain de temps. Cette stratégie est d'ailleurs suivie dans de nombreux travaux (Anand et Kothari, 1996 ; Ben Bettaieb, 2006 ; Ben Bettaieb et al., 2012). Cependant, dans l'implantation du code de calcul lié à cet algorithme, l'analyse combinatoire est exécutée lorsque la méthode de recherche itérative ne permet pas de déterminer l'ensemble $\mathcal{A}$ en moins de 10 itérations. De par les résultats numériques obtenus, il sera

prouvé que le nombre de fois où l'on a recours à l'analyse combinatoire est très marginal (voir Figs. 1.9, 1.10 et 1.11).

- Étape 2 : Dans l'étape précédente, l'ensemble des systèmes actifs $\mathcal{A}$ ainsi que leurs vitesses de glissement ont été déterminés à l'instant t_i. L'algorithme présenté à l'étape courante a pour objectif de déterminer la longueur δt du sous-intervalle $I^\delta = [t_i, t_i + \delta t] \subset I^\Delta$ au-delà duquel le critère de Schmid n'est plus respecté. Pour tous les systèmes potentiellement actifs, le sous-pas de temps sur lequel le critère de Schmid reste satisfait est infini. En effet, pour chaque système potentiellement actif, les cissions critique et résolue sont identiques à l'instant initial t_i. Par ailleurs, comme cela a été mentionné dans l'Étape 1, les vitesses de glissement sont calculées de sorte que le taux de cission résolue $\dot{\tau}^\alpha(t_i)$ soit toujours inférieur ou égal à celui de la cission critique $\dot{\tau}_c^\alpha(t_i)$. Ainsi, quelle que soit la valeur du pas de temps Δt, les cissions résolue et critique actualisées par un développement de Taylor à l'ordre 1 vérifient toujours le critère de Schmid :

$$\forall \alpha \in \mathcal{P} : \quad \begin{cases} \tau^\alpha(t_f) \le \tau^\alpha(t_f) \\ \tau^\alpha(t_f) = \tau^\alpha(t_i) + \Delta t\, \mathbf{R}_{t_i}^\alpha : \left(\mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{d} - \boldsymbol{\sigma}_{t_i} \mathrm{Tr}(\mathbf{d}) - \dot{\gamma}_{t_i}^\beta \mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{R}_{t_i}^\beta\right) \quad ; \quad \beta \in \mathcal{P} \\ \tau_c^\alpha(t_f) = \tau_c^\alpha(t_i) + \Delta t\, h_{t_i}^{\alpha\beta}\, \dot{\gamma}_{t_i}^\beta \end{cases} \tag{1.91}$$

Il n'en est pas de même pour les systèmes n'appartenant pas à $\mathcal{P}$. Pour ces systèmes, le calcul des vitesses de glissement des systèmes actifs (mis en place à l'Étape 1) n'impose aucune restriction quant au signe de la différence entre taux de cissions résolue et critique. Ainsi, il n'est pas exclu de trouver un système $\alpha \notin \mathcal{P}$ tel que $\dot{\tau}^\alpha(t_i) > \dot{\tau}_c^\alpha(t_i)$ et que par conséquent :

$$\tau^\alpha(t_i) + \Delta t\, \dot{\tau}^\alpha(t_i) > \tau_c^\alpha(t_i) + \Delta t\, \dot{\tau}_c^\alpha(t_i) \tag{1.92}$$

Si nous notons $\mathcal{E}_2$ l'ensemble des systèmes satisfaisant l'inéquation (1.92), δt est le sous-pas de temps minimal (de Δt) qui vérifie la relation :

$$\forall \alpha \in \mathcal{E}_2 : \quad \tau^\alpha(t_i) + \delta t\, \dot{\tau}^\alpha(t_i) > \tau_c^\alpha(t_i) + \delta t\, \dot{\tau}_c^\alpha(t_i) \tag{1.93}$$

La valeur de δt est finalement déterminée par l'expression suivante :

$$\delta t = \min_{\alpha \notin \mathcal{P}} \left\{ \Delta t, \frac{\tau_c^\alpha(t_i) - \tau^\alpha(t_i)}{b_{t_i}^\alpha - P_{t_i}^{\alpha\beta}\, \dot{\gamma}_{t_i}^\beta} \quad ; \quad \beta \in \mathcal{A} \right\} \tag{1.94}$$

Une fois les vitesses de glissement calculées, les variables microscopiques caractérisant l'état mécanique du monocristal sont actualisées en utilisant les équations (1.57)–(1.59) et (1.66)–(1.69) avec pour pas de temps δt et pour instant final $t_f = t_i + \delta t$. Si $\delta t = \Delta t$, alors l'intégration sur le pas de temps I^Δ est terminée. Si par contre $\delta t < \Delta t$, on actualise le pas de

temps imposé en utilisant la relation (1.85) et l'algorithme décrit dans la Section 1.3.1.2.1 est à nouveau exécuté.

1.3.2 Forme régularisée du critère de Schmid

La forme régularisée du critère de Schmid se distingue fondamentalement de la forme classique par le fait que tous les systèmes sont théoriquement actifs et ont *a priori* des vitesses de glissement strictement positives (voir l'équation (1.42)). Ainsi, les notions de système actif et de système potentiellement actif ne sont pas pertinentes ici. Certains systèmes ont cependant des vitesses de glissement d'un ordre de grandeur très élevé par rapport à d'autres systèmes et pourraient être qualifiés "d'actifs". Dû à la valeur élevée de la puissance n utilisée usuellement dans la fonction de charge de la loi régularisée (voir l'équation (1.33)), l'intégration numérique se fera uniquement avec un algorithme évolutif contrairement au critère standard de Schmid.

L'algorithme évolutif proposé dans cette section pour l'intégration incrémentale des relations constitutives du monocristal à partir d'une forme régularisée du critère de Schmid repose sur une subdivision du pas de temps imposé $I^{\Delta} = \left[t_i, t_f\right]$, comme ce fût le cas pour le critère classique. En effet, un sous-pas de temps $I^{\Delta} = \left[t_i, t_i + \delta t\right]$ est requis, où δt est choisi aussi petit que nécessaire afin que l'approximation de la fonction de charge f_c (définie dans la relation (1.33)) par un développement de Taylor à l'ordre 1 soit précise :

$$f_c\left(t_i + \delta t\right) = f_c\left(t_i\right) + \delta t\, \dot{f}_c\left(t_i\right) + O\left(\delta t^2\right) = 0 \tag{1.95}$$

où $f_c\left(t_i\right)$ et $f_c\left(t_i + \delta t\right)$ sont respectivement les valeurs de la fonction de charge au début et à la fin du sous-pas de temps I^{δ}, et $O\left(\delta t^2\right)$ une fonction comprenant les termes en δt d'ordre supérieur ou égal à 2. Nous rappelons que, similairement au cas du critère de Schmid classique, toutes les quantités définissant l'état mécanique du monocristal sont connues à l'instant initial t_i. À cet instant, la fonction de charge f_c vérifie alors la relation suivante :

$$f_c\left(t_i\right) = \sum_{\alpha=1}^{2N_s} \left\langle \operatorname{sgn}\left(\tau^{\alpha}\left(t_i\right)\right)\right\rangle \left(\frac{\tau^{\alpha}\left(t_i\right)}{\tau_c^{\alpha}\left(t_i\right)}\right)^{2n} - 1 \tag{1.96}$$

Si nous supposons qu'au tout début de la déformation le matériau est sans contrainte interne, cette fonction de charge vaut –1. À la fin du sous-pas de temps I^{δ}, la fonction de charge vérifie la relation suivante :

$$f_c\left(t_f\right) = \sum_{\alpha=1}^{2N_s} \left\langle \operatorname{sgn}\left(\tau^{\alpha}\left(t_i\right)\right)\right\rangle \left(\frac{\tau^{\alpha}\left(t_f\right)}{\tau_c^{\alpha}\left(t_f\right)}\right)^{2n} - 1 \tag{1.97}$$

en supposant que τ^{α} garde un signe constant sur tout le pas de temps I^{Δ}. Nous rappelons que les expressions des cissions résolue et critique des systèmes de glissement à l'instant final t_f sont données par l'équation (1.87). Il est important de préciser que le cas particulier d'un état de déformation purement élastique se traduit par des vitesses de glissement nulles pour tous les systèmes. Il faut également mentionner que dans la relation (1.97), les cissions résolues des différents systèmes conservent leurs signes sur tout le sous-pas de temps I^{δ}.

L'algorithme décrit dans cette section a la même structure que l'algorithme évolutif développé pour le critère classique de Schmid dont les détails ont été donnés dans la Section 1.3.1.2. Cet algorithme est défini par deux phases différentes : une phase purement élastique lorsque la fonction de charge initiale $f_c(t_i)$ est strictement négative et une phase élastoplastique lorsque l'état de contrainte se trouve sur la surface de charge et que, par conséquent, la fonction de charge $f_c(t_i)$ est nulle.

1.3.2.1 Phase purement élastique du comportement du monocristal

L'algorithme décrit dans cette section est exécuté lorsque le comportement du matériau est purement élastique et qu'à ce titre la fonction de charge $f_c(t_i)$ est strictement négative. Il convient alors de déterminer le pas de temps δt nécessaire pour que l'état de contrainte atteigne la surface de plasticité. Cela se traduit numériquement par un passage de la fonction de charge d'une valeur strictement négative à une valeur nulle. Une évaluation préalable de $f_c(t_i + \Delta t)$ est nécessaire pour pouvoir déterminer δt. Pour ce faire, il suffit d'utiliser les relations (1.87) et (1.97) (en remplaçant les vitesses de glissement par zéro, de même que δt par Δt). Suivant le signe de $f_c(t_i + \Delta t)$, deux cas de figure sont possibles :

- Si $f_c(t_i + \Delta t) \leq 0$, le comportement du monocristal est purement élastique sur le pas de temps imposé I^{Δ}. Dans ce cas, δt est égal à Δt. Similairement au critère standard de Schmid, on actualise la rotation et la contrainte de Cauchy grâce aux relations (1.83) et (1.84) puis on passe à l'incrément suivant.
- Si $f_c(t_i + \Delta t) > 0$, alors le comportement du monocristal n'est purement élastique que sur un sous-pas de temps I^{δ} que l'on doit déterminer, et élastoplastique sur le reste du pas de temps imposé I^{Δ}. Ce sous-pas de temps δt est numériquement calculé par dichotomie en passant par les étapes suivantes :
    - ✓ Étape 0 : Avant la première itération ($k = 0$), on initialise l'intervalle de temps sur lequel est appliqué l'approche par dichotomie. Il vaut $I_0^{\delta} = \left[t_i^0, t_f^0\right]$ avec $t_i^0 = t_i$ et $t_f^0 = t_i + \Delta t$.

- ✓ Étape 1 : À l'itération courante k ($k \geq 1$), on calcule la valeur de la fonction de charge à l'instant $t_f^{(k)} = t_i^{(k)} + \delta t^{(k)}$, $\delta t^{(k)}$ étant le milieu de l'intervalle $I^{\delta\,(k)} = \left[t_i^{(k)}, t_f^{(k)}\right]$.

  Suivant l'hypothèse d'une déformation purement élastique, $f_c\left(t_f^{(k)}\right)$ vaut :

$$f_c\left(t_f^{(k)}\right) = \sum_{\alpha=1}^{2N_s} \left\langle \operatorname{sgn}\left(\tau^\alpha\left(t_i\right)\right)\right\rangle \left(\frac{\tau^\alpha\left(t_i\right) + \delta t^{(k)} \mathbf{R}_{t_i}^\alpha : \left(\mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{d} - \boldsymbol{\sigma}_{t_i} \operatorname{Tr}\left(\mathbf{d}\right)\right)}{\tau_c^\alpha\left(t_i\right)}\right)^{2n} - 1 \qquad (1.98)$$

  On passe ensuite à l'étape suivante :

- ✓ Étape 2 : Selon la valeur de $f_c\left(t_f^{(k)}\right)$ trois possibilités se présentent :

  ∗ Si $f_c\left(t_f^{(k)}\right)$ est comprise entre -10^{-8} et 0, alors le pas de temps δt^k calculé à l'étape précédente est celui que l'on recherche ($\delta t = \delta t^{(k)}$). On actualise les différentes variables mécaniques en utilisant les relations (1.83) et (1.84), puis on actualise t_i, Δt, t_f et I^Δ en utilisant les règles d'actualisation (1.85). Ensuite, on exécute l'algorithme élastoplastique détaillé dans la Section 1.3.2.2.

  ∗ Si $f_c\left(t_f^{(k)}\right) < -10^{-8}$ alors on détermine les bornes du sous-intervalle de temps $I_{(k+1)}^\delta$ de la manière suivante : $t_i^{(k+1)} = t_i^{(k)} + \delta t^{(k)}$; $t_f^{(k+1)} = t_f^{(k)}$.

  ∗ Si par contre $f_c\left(t_f^{(k)}\right) > 0$ alors les bornes de I_{k+1}^δ doivent vérifier les relations suivantes :

  $t_i^{(k+1)} = t_i^{(k)}$; $t_f^{(k+1)} = t_f^{(k)} - \delta t^{(k)}$.

  Dans les deux derniers cas, on actualise le numéro de l'itération ($k \leftarrow k+1$) et on reprend le calcul itératif à partir de l'Étape 1. Il faut par ailleurs remarquer que les bornes de l'intervalle $I_{(k)}^\delta$ sont des suites adjacentes et que, par conséquent, l'approche par dichotomie converge toujours. Autrement dit, la première possibilité décrite dans cette étape finit toujours par être réalisée au bout d'un certain nombre d'itérations.

1.3.2.2 Détermination des vitesses de glissement des différents systèmes

Dans cette section nous présentons l'algorithme de détermination des vitesses de glissement des différents systèmes cristallographiques. Au début du pas de temps imposé I^Δ, la valeur de $f_c\left(t_i\right)$ est comprise entre -10^{-8} et 0 (voir Section 1.3.2.1). Comme pour le cas de la version classique du critère de Schmid, une détermination explicite des vitesses de glissement est d'abord effectuée. Ensuite, le sous-pas de temps δt ($\delta t \leq \Delta t$) est calculé pour que $f_c\left(t_i + \delta t\right)$ garde une valeur entre -10^{-8} et 0. Le calcul des vitesses de glissement et la détermination de δt sont décrit par les deux étapes suivantes :

- Étape 1 : À la première itération de cette étape, le sous-pas de temps δt est supposé être égal au pas de temps imposé Δt. Le multiplicateur plastique $\dot{\lambda}$ indispensable au calcul de toutes les vitesses de glissement (voir la relation (1.35)) est déterminé par la forme suivante de la relation de cohérence :

$$f_c\left(t_i\right) + \delta t\, \dot{f}_c\left(t_i\right) = 0 \tag{1.99}$$

Dans l'équation (1.99), il faut souligner le fait que $f_c\left(t_i\right)$, bien qu'ayant des valeurs extrêmement faibles (entre -10^{-8} et 0), ne saurait être négligé par rapport au terme $\delta t\, \dot{f}_c\left(t_i\right)$. En combinant les relations (1.37), (1.38) et (1.99), on en déduit l'expression de $\dot{\lambda}$:

$$\dot{\lambda} = \frac{f_c\left(t_i\right)}{2n\,\Delta t\, x\left(t_i\right)} + \frac{\mathcal{F}_{t_i} : \mathbf{d}}{x\left(t_i\right)} \tag{1.100}$$

où $\mathcal{F}_{t_i}$ et $x\left(t_i\right)$ sont respectivement les valeurs de $\mathcal{F}$ et x à l'instant t_i (voir les relations (1.40) et (1.41) pour plus de détails). Une fois $\dot{\lambda}$ calculé, les vitesses de glissement des différents systèmes sont aisément déductibles en se basant sur la relation (1.35) :

$$\forall \alpha = 1,\ldots,2N_s : \quad \dot{\gamma}^{\alpha}_{t_i} = \dot{\lambda} \frac{\left\langle \operatorname{sgn}\left(\tau^{\alpha}\left(t_i\right)\right)\right\rangle}{\tau^{\alpha}_c\left(t_i\right)} \left(\frac{\tau^{\alpha}\left(t_i\right)}{\tau^{\alpha}_c\left(t_i\right)} \right)^{2n-1} \tag{1.101}$$

Une fois les vitesses de glissement déterminées, on passe alors à l'Étape 2.

- Étape 2 : Cette étape a pour objectif de déterminer d'une manière itérative le sous-pas de temps δt tel que la fonction de charge correspondante vérifie la relation $-10^{-8} < f_c\left(t_i + \delta t\right) < 0$. Idéalement, un calcul direct du sous-pas de temps maximal vérifiant cette relation est souhaitable comme c'est le cas lorsqu'on utilise le critère de Schmid classique dans la relation (1.94). Cependant, cela reste très complexe à mettre en œuvre vu la forme puissance de la fonction de charge utilisée. Un test trivial serait de choisir initialement $\delta t = \Delta t$ et de calculer $f_c\left(t_i + \delta t\right)$ (en utilisant la relation (1.97)). S'il s'avère que sa valeur est comprise entre -10^{-8} et 0, alors le pas de temps imposé Δt est suffisamment petit pour satisfaire la relation (1.95). On actualise alors les différentes variables définissant l'état mécanique du monocristal à travers les relations (1.57)–(1.59), (1.66)–(1.69) et on passe à l'incrément suivant pour une intégration sur un nouveau pas de temps. Si par contre $f_c\left(t_i + \delta t\right)$ est positive, alors une méthode approximative qui consiste à diviser le pas de temps δt par 2 jusqu'à la satisfaction de la condition $-10^{-8} < f_c\left(t_i + \delta t\right) < 0$ est mise en place à travers les différentes sous-étapes suivantes :

  - ✓ Étape 2.1 : À l'itération courante k, on calcule le multiplicateur plastique $\dot{\lambda}$ via la relation suivante :

$$\dot{\lambda}^{(k)} = \frac{f_c\left(t_i\right)}{2n\,\delta t^{(k)}\,x\left(t_i\right)} + \frac{\mathcal{F}_{t_i} : \mathbf{d}}{x\left(t_i\right)} \tag{1.102}$$

On calcule ensuite les vitesses de glissement des différents systèmes :

$$\forall \alpha = 1,...,2N_s : \quad \dot{\gamma}_{t_i}^{\alpha(k)} = \dot{\lambda}^{(k)} \frac{\left\langle \operatorname{sgn}\left(\tau^{\alpha}\left(t_i\right)\right)\right\rangle}{\tau_c^{\alpha}\left(t_i\right)} \left(\frac{\tau^{\alpha}\left(t_i\right)}{\tau_c^{\alpha}\left(t_i\right)}\right)^{2n-1} \tag{1.103}$$

Une fois que les vitesses de glissement sont déterminées par l'équation (1.103), on peut calculer la valeur de $f_c\left(t_i + \delta t^{(k)}\right)$. Si cette valeur satisfait la condition $-10^{-8} < f_c\left(t_i + \delta t^{(k)}\right) < 0$, alors le sous-pas de temps est entièrement déterminé et δt vaut $\delta t^{(k)}$. L'intégration des relations constitutives du monocristal sur ce sous-pas se termine donc par une actualisation des variables caractérisant l'état mécanique du système grâce aux relations (1.57)–(1.59), (1.66)–(1.69). On actualise ensuite le pas de temps imposé I^{Δ} en utilisant la relation (1.85) et l'algorithme décrit à l'Étape 1 est à nouveau exécuté. Si par contre, la condition $-10^{-8} < f_c\left(t_i + \delta t^{(k)}\right) < 0$ n'est pas satisfaite, alors l'Étape 2.2 est exécutée.

- ✓ Étape 2.2 : Cette étape est exécutée si le pas de temps correspondant à l'itération courante ne permet pas d'obtenir des valeurs de f_c comprise entre -10^{-8} et 0. On actualise alors le pas de temps par la relation $\delta t^{(k+1)} = \frac{\delta t^{(k)}}{2}$ puis on exécute à nouveau l'Étape 2.1 après une incrémentation du numéro d'itération ($k \leftarrow k+1$).

Lorsque le paramètre d'arrondissement de la surface de charge n est très élevé, le schéma itératif défini par les deux sous-étapes présentées plus haut, à savoir l'Étape 2.1 et l'Étape 2.2, nécessite un très grand nombre de subdivisions du pas de temps imposé. Ce nombre augmente avec la valeur de n. Pour réduire le nombre de subdivisions, la dérivée de la fonction de charge $\dot{f}_c$ est exprimée au juste milieu du sous-pas de temps $I^{\delta} = \left[t_i, t_i + \delta t\right]$. Dans ce cas, la valeur de f_c à $t_i + \delta t$ peut être obtenue par l'approximation suivante :

$$f_c\left(t_i + \delta t\right) = f_c\left(t_i\right) + \delta t\,\dot{f}_c\left(t_i + \frac{\delta t}{2}\right) + O\left(\delta t^2\right) = 0 \tag{1.104}$$

En comparant l'équation (1.104) avec la relation (1.95), il apparaît évident qu'en exprimant la dérivée de f_c en $t_i + \frac{\delta t}{2}$, l'erreur commise par l'approximation de $f_c\left(t_i + \delta t\right)$ par rapport à δt passe de l'ordre 1 à l'ordre 2. Par conséquent, les vitesses de glissement des différents systèmes ainsi que les dérivées de toutes les variables caractérisant l'état mécanique du système sont exprimées à l'instant $t_i + \frac{\delta t}{2}$. Par

rapport au schéma numérique détaillé plus haut, la différence se situe au niveau de l'Étape 2.1 qui est remplacée par les deux sous-étapes suivantes :

- ✓ Étape 2.1.1 : À l'itération courante k, on calcule une première fois le multiplicateur plastique $\dot{\lambda}$ vérifiant la relation :

$$f_c\left(t_i\right)+\frac{\delta t^{(k)}}{2}\dot{f}_c\left(t_i\right)=0 \tag{1.105}$$

Similairement à la relation (1.100), on obtient :

$$\dot{\lambda}^{(k)}=\frac{f_c\left(t_i\right)}{n\,\delta t^{(k)}\,x\left(t_i\right)}+\frac{\mathcal{F}_{t_i}:\mathbf{d}}{x\left(t_i\right)} \tag{1.106}$$

On calcule ensuite les vitesses de glissement à l'instant t_i en utilisant la relation (1.103) puis on actualise les variables mécaniques à l'instant $t_i+\frac{\delta t^{(k)}}{2}$ en utilisant les relations (1.57)–(1.59), (1.66)–(1.69). L'Étape 2.1.2 est ensuite exécutée.

- ✓ Étape 2.1.2 : À cette étape, les valeurs des différentes variables à l'instant $t_i+\frac{\delta t^{(k)}}{2}$ sont connues. Pour simplifier les notations, nous désignerons par $t^{(k)}_{i+\frac{1}{2}}$ l'expression $t_i+\frac{\delta t^{(k)}}{2}$. On calcule une seconde fois le multiplicateur plastique $\dot{\lambda}^{(k)}$ qui vérifie cette fois-ci la relation suivante :

$$f_c\left(t_i\right)+\delta t^{(k)}\,\dot{f}_c\left(t^{(k)}_{i+\frac{1}{2}}\right)=0 \tag{1.107}$$

On obtient alors :

$$\dot{\lambda}^{(k)}=\frac{f_c\left(t_i\right)}{2n\,\delta t^{(k)}\,x\left(t^{(k)}_{i+\frac{1}{2}}\right)}+\frac{\mathcal{F}_{t^{(k)}_{i+\frac{1}{2}}}:\mathbf{d}}{x\left(t^{(k)}_{i+\frac{1}{2}}\right)} \tag{1.108}$$

On calcule ensuite les vitesses de glissement à l'instant $t^{(k)}_{i+\frac{1}{2}}$:

$$\forall\alpha=1,\ldots,2N_s:\quad \dot{\gamma}^{\alpha\,(k)}_{t^{k}_{i+\frac{1}{2}}}=\dot{\lambda}^{(k)}\frac{\left\langle \operatorname{sgn}\left(\tau^{\alpha}\left(t^{(k)}_{i+\frac{1}{2}}\right)\right)\right\rangle}{\tau^{\alpha}_{c}\left(t^{(k)}_{i+\frac{1}{2}}\right)}\left(\frac{\tau^{\alpha}\left(t^{(k)}_{i+\frac{1}{2}}\right)}{\tau^{\alpha}_{c}\left(t^{(k)}_{i+\frac{1}{2}}\right)}\right)^{2n-1} \tag{1.109}$$

Si $-10^{-8}<f_c\left(t_i+\delta t^{(k)}\right)<0$, alors $\delta t=\delta t^{(k)}$ et les valeurs des vitesses de glissement calculées dans la relation (1.109) sont ensuite utilisées pour actualiser les différentes

variables caractérisant l'état mécanique du monocristal, grâce aux relations (1.58), (1.59), (1.66)–(1.69). Le pas de temps imposé I^{Δ} est ensuite actualisé à travers la relation (1.85), et l'algorithme décrit à l'Étape 1 est à nouveau exécuté. Si par contre, la condition $-10^{-8} < f_c\left(t_i + \delta t^{(k)}\right) < 0$ n'est pas satisfaite, alors l'Étape 2.2 est exécutée.

1.3.3 Module tangent cohérent relatif à l'algorithme évolutif appliqué au critère classique de Schmid

Dans cette section, nous nous intéressons au développement de l'expression du module tangent cohérent relatif à l'algorithme évolutif dans le cadre du critère classique de Schmid. L'objectif visé étant d'implanter cet algorithme, sous la forme d'une routine utilisateur UMAT, dans le logiciel de calcul par éléments finis ABAQUS/Standard. Les équations non-linéaires d'équilibre sont résolues dans ABAQUS/Standard par la méthode itérative de Newton–Raphson. Cette résolution implicite permet d'utiliser des pas de temps assez élevés, tout en maintenant les équations d'équilibre vérifiées. La convergence rapide du schéma itératif de Newton–Raphson nécessite le calcul d'un module tangent qui soit cohérent avec le schéma d'intégration appliqué pour intégrer les équations constitutives à chaque point de Gauss (qui sont celles des monocristaux dans ce cas particulier). Ce module tangent cohérent est défini comme étant celui qui relie une petite variation de l'incrément de contrainte à la variation associée de l'incrément de déformation. Il est parfois d'usage de substituer le module tangent analytique au module tangent cohérent. Cette substitution est motivée par le fait que la détermination du module tangent analytique est relativement plus simple que celle du module tangent cohérent. Cependant, l'utilisation systématique du module tangent analytique ne permet pas toujours d'obtenir la convergence quadratique escomptée (Miehe et al., 1999 ; Terada et Watanabe, 2007 ; Kobayashi et al., 2003). Cette convergence quadratique qui permet de minimiser le nombre d'itérations nécessaire et par conséquent le temps de calcul n'est obtenue qu'en utilisant le module tangent cohérent (appelé parfois aussi module tangent algorithmique). Nous désignerons par $\mathbf{c}_c^{ep}$ ce module tangent cohérent qui est défini par la relation suivante :

$$\mathcal{D}\left(\Delta\boldsymbol{\sigma}\right) = \mathbf{c}_c^{ep} : \mathcal{D}\left(\Delta t\,\mathbf{d}\right) \tag{1.110}$$

où $\mathcal{D}$ représente l'opérateur de différentiation, Δt le pas de temps imposé, $\Delta t\,\mathbf{d}$ l'incrément de déformation et $\Delta\boldsymbol{\sigma}$ l'incrément de contrainte correspondant.

Pour déterminer $\mathbf{c}_c^{ep}$, nous partons de l'expression (1.66) de la contrainte de Cauchy. L'incrément de rotation $\mathbf{r}_{\Delta t}$ entre le début et la fin du pas de temps imposé Δt peut être déduit de l'équation (1.58) :

$$\mathbf{r}_{\Delta t} = \mathbf{exp}\left(\Delta t\left(\mathbf{w} - \dot{\gamma}_{t_i}^{\alpha}\mathbf{S}_{t_i}^{\alpha}\right)\right) \quad ; \quad \alpha = 1,...,2N_s \tag{1.111}$$

En supposant que $\Delta t\left(\mathbf{w}-\dot{\gamma}^{\alpha}_{t_i}\mathbf{S}^{\alpha}_{t_i}\right)$ est très faible devant $\mathbf{I}_2$ (ce qui est vrai pour les différentes simulations réalisées dans le cadre de cette thèse), on peut approcher $\mathbf{r}_{\Delta t}$ par l'approximation suivante :

$$\mathbf{r}_{\Delta t}=\mathbf{I}_2+\Delta t\left(\mathbf{w}-\dot{\gamma}^{\alpha}_{t_i}\mathbf{S}^{\alpha}_{t_i}\right)\quad;\quad \alpha=1,...,2N_s \tag{1.112}$$

En insérant l'expression (1.112) de $\mathbf{r}_{\Delta t}$ dans (1.66) et en négligeant les termes en Δt^2 et Δt^3, on obtient l'expression suivante de $\boldsymbol{\sigma}_{t_f}$:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}_{t_f}&=\boldsymbol{\sigma}_{t_i}+\Delta t\left[\mathbf{C}_{t_i}:\mathbf{d}-\boldsymbol{\sigma}_{t_i}\,\mathrm{Tr}\left(\mathbf{d}\right)+\left(\mathbf{w}.\boldsymbol{\sigma}_{t_i}-\boldsymbol{\sigma}_{t_i}.\mathbf{w}\right)-\dot{\gamma}^{\alpha}_{t_i}\left(\mathbf{C}_{t_i}:\mathbf{R}^{\alpha}_{t_i}+\mathbf{S}^{\alpha}_{t_i}.\boldsymbol{\sigma}_{t_i}-\boldsymbol{\sigma}_{t_i}.\mathbf{S}^{\alpha}_{t_i}\right)\right]\\&\quad;\quad \alpha=1,...,2N_s\end{aligned} \tag{1.113}$$

L'incrément de contrainte $\Delta\boldsymbol{\sigma}$ peut alors être obtenu en combinant les équations (1.52), (1.53) et (1.113) :

$$\begin{aligned}\Delta\boldsymbol{\sigma}=&\left[\mathbf{C}_{t_i}-\boldsymbol{\sigma}_{t_i}\otimes\mathbf{I}_2-M^{\alpha\beta}_{t_i}\left(\mathbf{C}_{t_i}:\mathbf{R}^{\alpha}_{t_i}+\mathbf{S}^{\alpha}_{t_i}.\boldsymbol{\sigma}_{t_i}-\boldsymbol{\sigma}_{t_i}.\mathbf{S}^{\alpha}_{t_i}\right)\otimes\left(\mathbf{R}^{\beta}_{t_i}:\left(\mathbf{C}_{t_i}-\boldsymbol{\sigma}_{t_i}\otimes\mathbf{I}_2\right)\right)\right]:\left(\Delta t\,\mathbf{d}\right)\\&+\Delta t\left(\mathbf{w}.\boldsymbol{\sigma}_{t_i}-\boldsymbol{\sigma}_{t_i}.\mathbf{w}\right)\quad;\quad \alpha,\beta\in\mathcal{A}\end{aligned} \tag{1.114}$$

Similairement à la relation (1.51), le produit contracté $\mathbf{w}.\boldsymbol{\sigma}$ peut se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned}\forall\, i,j=1,2,3:\quad \left(\mathbf{w}.\boldsymbol{\sigma}\right)_{ij}&=w_{ip}\sigma_{pj}=\frac{1}{2}\left(g_{ip}-g_{pi}\right)\sigma_{pj}\\&=\frac{1}{2}\left(\delta_{ik}\delta_{lp}-\delta_{pk}\delta_{il}\right)g_{kl}\sigma_{ip}\\&=\frac{1}{2}\left(\delta_{ik}\sigma_{il}-\delta_{il}\sigma_{ik}\right)g_{kl}\\&={}^{3}_{\boldsymbol{\sigma}}l_{ijkl}g_{kl}\qquad;\qquad k,l,p=1,2,3\end{aligned} \tag{1.115}$$

En utilisant la relation (1.115), l'équation (1.114) devient alors

$$\begin{aligned}\Delta\boldsymbol{\sigma}=\Delta t&\left[\mathbf{C}_{t_i}-\boldsymbol{\sigma}_{t_i}\otimes\mathbf{I}_2+{}^{3}_{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{l}_{t_i}-M^{\alpha\beta}_{t_i}\left(\mathbf{C}_{t_i}:\mathbf{R}^{\alpha}_{t_i}+\mathbf{S}^{\alpha}_{t_i}.\boldsymbol{\sigma}_{t_i}-\boldsymbol{\sigma}_{t_i}.\mathbf{S}^{\alpha}_{t_i}\right)\otimes\left(\mathbf{R}^{\beta}_{t_i}:\left(\mathbf{C}_{t_i}-\boldsymbol{\sigma}_{t_i}\otimes\mathbf{I}_2\right)\right)\right]:\mathbf{g}\\&\quad;\quad \alpha,\beta\in\mathcal{A}\end{aligned} \tag{1.116}$$

Désignons par $\mathbf{l}^s$ le module sécant dont l'expression analytique vaut :

$$\mathbf{l}^s=\mathbf{C}-\boldsymbol{\sigma}\otimes\mathbf{I}_2+{}^{3}_{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{l}-M^{\alpha\beta}\left(\mathbf{C}:\mathbf{R}^{\alpha}+\mathbf{S}^{\alpha}.\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{\sigma}.\mathbf{S}^{\alpha}\right)\otimes\left(\mathbf{R}^{\beta}:\left(\mathbf{C}-\boldsymbol{\sigma}\otimes\mathbf{I}_2\right)\right)\quad;\quad \alpha,\beta\in\mathcal{A} \tag{1.117}$$

L'équation (1.116) peut être réécrite de façon équivalente sous la forme

$$\Delta\boldsymbol{\sigma}=\Delta t\;\mathbf{l}^s_{t_i}:\mathbf{g} \tag{1.118}$$

En ne considérant que la partie symétrique de l'équation (1.118), on obtient finalement :

$$\mathbf{c}^{ep}_{c}\left(t_i\right)=\mathbf{l}^{s\ sym}_{t_i} \tag{1.119}$$

où le tenseur $\mathbf{l}^{s\ sym}$ vérifie la relation indicielle suivante :

$$\forall\, i,j,k,l = 1,2,3: \quad l_{ijkl}^{s\ sym} = \frac{1}{2}\left(l_{ijkl}^{s} + l_{ijlk}^{s}\right) \tag{1.120}$$

En réalité, la particularité de l'algorithme évolutif est que le pas de temps imposé $I^{\Delta} = \left[t_0, t_0 + \Delta t\right]$ est subdivisé en plusieurs sous-pas de temps $I^{\delta_1} = \left[t_0, t_1\right]$, $I^{\delta_2} = \left[t_1, t_2\right]$,..., $I^{\delta_n} = \left[t_{n-1}, t_0 + \Delta t\right]$ suivant l'évolution de l'activité des systèmes. Ainsi, à chaque sous-pas de temps $I^{\delta_k} = \left[t_{k-1}, t_{k-1} + \delta t^k\right]$, correspond son module tangent cohérent $\mathbf{c}_c^{ep}(t_{k-1})$ vérifiant la relation :

$$\forall\, k = 1,...,n: \quad \mathcal{D}\left(\delta\boldsymbol{\sigma}\right)^k = \mathbf{c}_c^{ep}\left(t_{k-1}\right) : \mathcal{D}\left(\delta t^k\, \mathbf{d}\right) \tag{1.121}$$

En additionnant l'équation (1.121) sur tous les sous-pas de temps qui constituent le pas de temps global I^{Δ}, on obtient l'expression de $\mathcal{D}\left(\Delta\boldsymbol{\sigma}\right)$ relative au pas de temps imposé :

$$\mathcal{D}\left(\Delta\boldsymbol{\sigma}\right) = \frac{1}{\Delta t}\left(\delta t^k \mathbf{c}_c^{ep}\left(t_{k-1}\right)\right) : \mathcal{D}\left(\Delta t\, \mathbf{d}\right) \quad ; \quad k = 1,...,n \tag{1.122}$$

De l'équation (1.122), on déduit donc l'expression du module tangent cohérent relatif à l'algorithme évolutif et au critère classique de Schmid :

$$\mathbf{c}_c^{ep} = \frac{1}{\Delta t}\left(\delta t^k \mathbf{c}_c^{ep}\left(t_{k-1}\right)\right) \quad ; \quad k = 1,...,n \tag{1.123}$$

La pertinence de ce module tangent cohérent sera mise en évidence dans le prochain chapitre, à travers des résultats numériques relatifs à la modélisation du comportement d'agrégats polycristallins ainsi qu'à la simulation numérique de structures polycristallines.

1.4 Influence de la distorsion du réseau cristallographique sur le comportement plastique

Bien que les équations constitutives du monocristal présentées dans la Section 1.2 soient très largement adoptées dans la littérature, elles font l'objet de certaines critiques. En effet, la déformation élastique $\mathbf{v}^e$ qui caractérise la distorsion du réseau cristallographique est négligée dans la description du glissement cristallographique (voir l'équation (1.7)), mais elle est prise en compte dans la loi de comportement élastique (voir la relation (1.10)). Lipinski (1993) affirme que cette simplification "non-homogène" opérée par Iwakuma et Nemat-Nasser (1984) conduit à une dissymétrie du module tangent analytique, qui à son tour engendre un comportement instable du matériau à l'échelle du polycristal. Pour y remédier, Lipinski (1993) a proposé de revenir au modèle développé dans Hill et Rice (1972), qu'il a présenté sous une forme plus explicite. Nous rappelons dans cette section les principales relations de ce modèle et le lecteur est invité à consulter Lipinski (1993) pour plus de détails.

Ce modèle se distingue du précédent (exposé dans la Section 1.2) par l'introduction d'un gradient de transformation du réseau cristallographique noté $\mathbf{f}^*$ qui est distinct de $\mathbf{f}^e$. De manière analogue à l'équation (1.6), $\mathbf{f}^*$ vérifie la relation :

$$\forall \alpha = 1,...,2N_s : \quad \vec{\mathbf{m}}^\alpha = \mathbf{f}^*.\vec{\mathbf{m}}_I^\alpha \quad ; \quad \vec{\mathbf{n}}^\alpha = \left(\mathbf{f}^*\right)^{-T}.\vec{\mathbf{n}}_I^\alpha \tag{1.124}$$

où $\vec{\mathbf{m}}_I^\alpha$ et $\vec{\mathbf{n}}_I^\alpha$ sont les vecteurs unitaires représentant respectivement la direction de glissement et le vecteur normal au plan de glissement du système α dans la configuration initiale (au début de la déformation). Ils s'obtiennent donc en appliquant au début de la déformation le tenseur de rotation $\mathbf{r}$ à leurs homologues $\vec{\mathbf{m}}_0^\alpha$ et $\vec{\mathbf{n}}_0^\alpha$ de la configuration relaxée. Il faut préciser que leurs homologues $\vec{\mathbf{m}}^\alpha$ et $\vec{\mathbf{n}}^\alpha$ de la configuration déformée sont orthogonaux mais pas unitaires (à cause de la distorsion du réseau cristallin).

De façon analogue à la relation (1.8), le glissement cristallographique au sein du monocristal est régi par la relation suivante :

$$\mathbf{g} - \mathbf{g}^* = \dot{\gamma}^\beta \mathbf{M}^\beta \quad ; \quad \beta = 1,...,2N_s \tag{1.125}$$

où $\mathbf{g}^*$ est égal à $\dot{\mathbf{f}}^*\left(\mathbf{f}^*\right)^{-1}$.

Similairement à la relation $(1.5)_4$, la rotation du réseau cristallographique est définie par un tenseur de rotation $\mathbf{r}^*$ paramétré par les trois angles d'Euler (voir l'équation (1.1)) et dont la loi d'évolution vérifie la relation :

$$\dot{\mathbf{r}}^*.\left(\mathbf{r}^*\right)^T = \mathbf{w}^* = \mathbf{w} - \dot{\gamma}^\beta \mathbf{S}^\beta \quad ; \quad \beta = 1,...,2N_s \tag{1.126}$$

où $\mathbf{w}^*$ est la partie antisymétrique de $\mathbf{g}^*$.

Par ailleurs, le taux de déformation plastique s'exprime sous la forme :

$$\mathbf{d}^p = \dot{\gamma}^\beta \boldsymbol{\mu}^\beta \quad ; \quad \beta = 1,...,2N_s \tag{1.127}$$

où $\boldsymbol{\mu}^\beta$ est un tenseur d'ordre 2 relatif au système de glissement β, et qui s'exprime en fonction de la contrainte de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ et du tenseur de Schmid $\mathbf{M}^\beta$.

La partie élastique du comportement est décrite par une relation similaire à celle de l'équation (1.10) :

$$\delta_{Tr}\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \left(\mathbf{d} - \mathbf{d}^p\right) = \mathbf{C} : \left(\mathbf{d} - \dot{\gamma}^\beta \boldsymbol{\mu}^\beta\right) \quad ; \quad \beta = 1,...,2N_s, \tag{1.128}$$

où $\delta_{Tr}\boldsymbol{\sigma}$ est la dérivée objective de Truesdell de $\boldsymbol{\sigma}$. Cette dérivée objective est définie par la relation suivante :

$$\delta_{Tr}\boldsymbol{\sigma} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \mathbf{g}.\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}.\mathbf{g}^T + \boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{Tr}\left(\mathbf{g}\right) \tag{1.129}$$

Par ailleurs, la dérivée de Truesdell de $\boldsymbol{\sigma}$ par rapport au réseau cristallographique qui est animé d'un mouvement déterminé par $\mathbf{g}^*$ vérifie la relation :

$$\delta^*_{\mathrm{Tr}}\boldsymbol{\sigma} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \mathbf{g}^*.\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}.\left(\mathbf{g}^*\right)^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{Tr}\left(\mathbf{g}^*\right) = \mathbf{C}:\mathbf{d}^* \tag{1.130}$$

où $\mathbf{d}^*$ est la partie symétrique de $\mathbf{g}^*$.

D'une part, en combinant les relations (1.129) et (1.130), on peut montrer que :

$$\delta_{\mathrm{Tr}}\boldsymbol{\sigma} - \delta^*_{\mathrm{Tr}}\boldsymbol{\sigma} = -\dot{\gamma}^{\beta}\left(\mathbf{M}^{\beta}.\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma}.\left(\mathbf{M}^{\beta}\right)^{\mathrm{T}}\right) \quad ; \quad \beta = 1,...,2\mathrm{N_s} \tag{1.131}$$

En combinant les relations (1.128) et (1.130), on peut montrer que :

$$\delta_{\mathrm{Tr}}\boldsymbol{\sigma} - \delta^*_{\mathrm{Tr}}\boldsymbol{\sigma} = \dot{\gamma}^{\beta}\,\mathbf{C}:\left(\mathbf{R}^{\beta} - \boldsymbol{\mu}^{\beta}\right) \quad ; \quad \beta = 1,...,2\mathrm{N_s} \tag{1.132}$$

En comparant les relations (1.131) et (1.132), on en déduit l'expression du tenseur $\boldsymbol{\mu}^{\beta}$:

$$\forall\beta = 1,...,2\mathrm{N_s} : \quad \boldsymbol{\mu}^{\beta} = \mathbf{R}^{\beta} + \mathbf{S}:\left(\mathbf{M}^{\beta}.\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma}.\left(\mathbf{M}^{\beta}\right)^{\mathrm{T}}\right) \tag{1.133}$$

où $\mathbf{S}$ est l'inverse de $\mathbf{C}$ et désigne le tenseur de compliance élastique.

Nous nous limiterons dans cette section à l'utilisation du critère classique de Schmid comme loi d'écoulement. À la différence du modèle proposé par Iwakuma et Nemat-Nasser (1984), la cission résolue d'un système α est définie comme la projection du tenseur de Kirchhoff $\boldsymbol{\tau}$ sur le tenseur d'orientation de Schmid $\mathbf{M}^{\alpha}$:

$$\forall\alpha = 1,...,2\mathrm{N_s} : \quad \tau^{\alpha} = \vec{\mathbf{m}}^{\alpha}.\boldsymbol{\tau}.\vec{\mathbf{n}}^{\alpha} = \mathbf{R}^{\alpha}:\boldsymbol{\sigma} \tag{1.134}$$

En effet, dans le cadre d'une approche lagrangienne actualisée, le tenseur de Kirchhoff vérifie les relations suivantes :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\sigma} \\ \dot{\boldsymbol{\tau}} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{Tr}\left(\mathbf{g}^*\right) \end{cases} \tag{1.135}$$

La dérivée de la cission résolue vérifie alors :

$$\forall\alpha = 1,...,2\mathrm{N_s} : \quad \dot{\tau}^{\alpha} = \dot{\vec{\mathbf{m}}}^{\alpha}.\boldsymbol{\sigma}.\vec{\mathbf{n}}^{\alpha} + \dot{\vec{\mathbf{m}}}^{\alpha}.\left(\dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{Tr}\left(\mathbf{g}^*\right)\right).\vec{\mathbf{n}}^{\alpha} + \vec{\mathbf{m}}^{\alpha}.\boldsymbol{\sigma}.\dot{\vec{\mathbf{n}}}^{\alpha} \tag{1.136}$$

Par ailleurs, il est facile de démontrer à partir de l'équation (1.124) que les vecteurs $\vec{\mathbf{m}}^{\alpha}$ et $\vec{\mathbf{n}}^{\alpha}$ ont les lois d'évolution suivantes :

$$\forall\alpha = 1,...,2\mathrm{N_s} : \quad \dot{\vec{\mathbf{m}}}^{\alpha} = \mathbf{g}^*.\vec{\mathbf{m}}^{\alpha} \quad ; \quad \dot{\vec{\mathbf{n}}}^{\alpha} = -\left(\mathbf{g}^*\right)^{\mathrm{T}}.\vec{\mathbf{n}}^{\alpha} \tag{1.137}$$

En insérant les relations (1.137) dans la relation (1.136), on montre aisément que la dérivée de la cission résolue peut se mettre sous la forme :

$$\forall \alpha = 1,...,2N_s : \quad \dot{\tau}^{\alpha} = \mathbf{M}^{\alpha} : \left(\dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma}\, \mathrm{Tr}\left(\mathbf{g}^*\right) - \boldsymbol{\sigma}.\left(\mathbf{g}^*\right)^T + \left(\mathbf{g}^*\right)^T.\boldsymbol{\sigma} \right) \tag{1.138}$$

Par ailleurs, l'expression (1.138) est équivalente à :

$$\forall \alpha = 1,...,2N_s : \quad \dot{\tau}^{\alpha} = \boldsymbol{\mu}^{\alpha} : \delta^*_{Tr}\boldsymbol{\sigma} \tag{1.139}$$

La relation (1.139) peut se démontrer à partir des relations (1.130) et (1.133). En effet on obtient :

$$\forall \alpha = 1,...,2N_s : \quad \boldsymbol{\mu}^{\alpha} : \delta^*_{Tr}\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{R}^{\alpha} : \left(\dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma}\, \mathrm{Tr}\left(\mathbf{g}^*\right) - \mathbf{g}^*.\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}.\left(\mathbf{g}^*\right)^T \right) + \mathbf{S} : \left(\mathbf{M}^{\alpha}.\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma}.\left(\mathbf{M}^{\alpha}\right)^T \right) : \delta^*_{Tr}\boldsymbol{\sigma}$$

(1.140)

Grâce à la relation (1.130), on a :

$$\begin{aligned} \forall \alpha = 1,...,2N_s : \quad \mathbf{S} : \left(\mathbf{M}^{\alpha}.\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma}.\left(\mathbf{M}^{\alpha}\right)^T \right) : \delta^*_{Tr}\boldsymbol{\sigma} &= \left(\mathbf{M}^{\alpha}.\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma}.\left(\mathbf{M}^{\alpha}\right)^T \right) : \mathbf{S} : \delta^*_{Tr}\boldsymbol{\sigma} \\ &= \left(\mathbf{M}^{\alpha}.\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma}.\left(\mathbf{M}^{\alpha}\right)^T \right) : \mathbf{d}^* \\ &= \left(\mathbf{M}^{\alpha}.\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma}.\left(\mathbf{M}^{\alpha}\right)^T \right) : \mathbf{g}^* \end{aligned} \tag{1.141}$$

car $\mathbf{S}$ admet la symétrie majeure et $\mathbf{M}^{\alpha}.\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma}.\left(\mathbf{M}^{\alpha}\right)^T$ est un tenseur d'ordre 2 symétrique.

En remarquant que :

$$\forall \alpha = 1,...,2N_s : \quad \begin{cases} \left(\mathbf{M}^{\alpha}.\boldsymbol{\sigma}\right) : \mathbf{g}^* = \mathbf{M}^{\alpha} : \left(\mathbf{g}^*.\boldsymbol{\sigma}\right) \\ \left(\boldsymbol{\sigma}.\left(\mathbf{M}^{\alpha}\right)^T\right) : \mathbf{g}^* = \mathbf{M}^{\alpha} : \left(\left(\mathbf{g}^*\right)^T.\boldsymbol{\sigma}\right) \end{cases} \tag{1.142}$$

l'équation (1.141) devient finalement :

$$\forall \alpha = 1,...,2N_s : \quad \mathbf{S} : \left(\mathbf{M}^{\alpha}.\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma}.\left(\mathbf{M}^{\alpha}\right)^T \right) : \delta^*_{Tr}\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{M}^{\alpha} : \left(\mathbf{g}^*.\boldsymbol{\sigma} + \left(\mathbf{g}^*\right)^T.\boldsymbol{\sigma} \right) \tag{1.143}$$

En insérant la relation (1.143) dans l'équation (1.140), on obtient de manière directe :

$$\forall \alpha = 1,...,2N_s : \quad \boldsymbol{\mu}^{\alpha} : \delta^*_{Tr}\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{M}^{\alpha} : \left(\dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma}\, \mathrm{Tr}\left(\mathbf{g}^*\right) - \mathbf{g}^*.\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}.\left(\mathbf{g}^*\right)^T \right) \tag{1.144}$$

En comparant l'équation (1.144) à (1.138), on retrouve la relation (1.139).

Afin de calculer les vitesses de glissement en appliquant la condition de cohérence associée à l'équation (1.29), il faut exprimer la dérivée de la cission résolue en fonction des vitesses de glissement. En insérant les relations (1.125) et (1.130) dans l'équation (1.139), on obtient :

$$\forall \alpha = 1,...,2N_s : \quad \dot{\tau}^{\alpha} = \boldsymbol{\mu}^{\alpha} : \mathbf{C} : \left(\mathbf{d} - \dot{\gamma}^{\beta}\, \mathbf{R}^{\beta} \right) \quad ; \quad \beta = 1,...,2N_s \tag{1.145}$$

En utilisant respectivement les équations (1.145) et (1.18), la condition de cohérence réduite aux systèmes actifs prend donc la forme suivante :

$$\forall \alpha \in \mathcal{A} : \quad \left(\boldsymbol{\lambda}^{\alpha} : \mathbf{R}^{\beta} + h^{\alpha\beta} \right) \dot{\gamma}^{\beta} = \boldsymbol{\lambda}^{\alpha} : \mathbf{d} \quad ; \quad \beta \in \mathcal{A} \tag{1.146}$$

où $\boldsymbol{\lambda}^{\alpha}$ est un tenseur d'ordre 2 qui vaut $\boldsymbol{\mu}^{\alpha} : \mathbf{C}$. Il faut remarquer que grâce aux symétries majeures de $\mathbf{C}$, $\boldsymbol{\lambda}^{\alpha}$ vaut également $\mathbf{C} : \boldsymbol{\mu}^{\alpha}$. De l'équation (1.146), on déduit enfin l'expression des vitesses de glissement :

$$\forall \alpha \in \mathcal{A} : \quad \dot{\gamma}^{\alpha} = \tilde{M}^{\alpha\beta} \boldsymbol{\lambda}^{\beta} : \mathbf{d} \quad ; \quad \beta \in \mathcal{A} \tag{1.147}$$

où $\tilde{\mathbf{M}}$ est l'inverse de la matrice $\tilde{\mathbf{P}}$ de dimension $\mathrm{Card}(\mathcal{A})$ qui est définie sous la forme indicielle suivante :

$$\forall \alpha, \beta \in \mathcal{A} : \quad \tilde{P}^{\alpha\beta} = \boldsymbol{\lambda}^{\alpha} : \mathbf{R}^{\beta} + h^{\alpha\beta} \tag{1.148}$$

En suivant une procédure analogue à celle développée dans la Section 1.2.4, on obtient l'expression suivante du module tangent analytique $\mathbf{l}$ reliant le taux de contrainte nominale $\dot{\mathbf{n}}$ au gradient de vitesse $\mathbf{g}$:

$$\mathbf{l} = \mathbf{C} + {}^{1}_{\boldsymbol{\sigma}}\tilde{\mathbf{I}} - \tilde{M}^{\alpha\beta} \boldsymbol{\lambda}^{\alpha} \otimes \boldsymbol{\lambda}^{\beta} \quad ; \quad \alpha, \beta \in \mathcal{A} \tag{1.149}$$

où ${}^{1}_{\boldsymbol{\sigma}}\tilde{\mathbf{I}}$ est un tenseur d'ordre 4 dont les composantes sont définies par la forme suivante :

$$\forall i, j, k, l = 1, 2, 3 : \quad {}^{1}_{\boldsymbol{\sigma}}\tilde{I}_{ijkl} = \sigma_{ik} \delta_{jl} \tag{1.150}$$

L'intégration des équations constitutives présentées plus haut s'effectue suivant la même procédure que celle détaillée dans la Section 1.3. Nous donnons en particulier l'expression de la contrainte à la fin du pas de temps imposé $I^{\Delta} = [t_i, t_f]$:

$$\boldsymbol{\sigma}_{t_f} = \left(\mathbf{f}^{*}_{\Delta t}\right)^{-T} . \left[\boldsymbol{\sigma}_{t_i} + \Delta t \left(\mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{d} + 2\, \mathbf{d}.\boldsymbol{\sigma}_{t_i} - \dot{\gamma}^{\beta}_{t_i} (\mathbf{C}_{t_i} : \mathbf{R}^{\beta}_{t_i} + 2\, \mathbf{R}^{\beta}_{t_i} . \boldsymbol{\sigma}_{t_i})\right)\right] . \left(\mathbf{f}^{*}_{\Delta t}\right)^{T} \quad ; \quad \beta = 1, ..., 2N_s \tag{1.151}$$

où $\mathbf{f}^{*}_{\Delta t}$ est le gradient de transformation du réseau cristallographique entre les deux configurations voisines Ω_{t_i} et Ω_{t_f}.

L'équation (1.151) est l'équivalent de l'équation (1.66) développée pour le modèle classique utilisé par Iwakuma et Nemat-Nasser (1984).

Les résultats numériques relatifs à l'application des deux différentes formulations des équations constitutives (celle utilisée par Iwakuma et Nemat-Nasser (1984) et celle utilisée par Lipinski (1993)) seront comparés dans la Section 1.5.

1.5 Résultats numériques et discussions

L'objectif de cette section est de comparer, d'une part, la performance et la précision des deux algorithmes développés dans les Sections 1.3.1.1 et 1.3.1.2 relatives à l'intégration des relations constitutives du monocristal en utilisant la loi de Schmid classique (en l'occurrence les algorithmes de retour radial et évolutif). D'autre part, il s'agit de mettre en lumière les similitudes mais aussi les

différences entre le modèle de comportement basé sur le critère de Schmid classique et le modèle basé sur la forme régularisée du critère de Schmid. Les différents algorithmes développés ont été implantés en FORTRAN90. Outre le fait que ce langage offre certains des avantages des langages orientés objet, tel que la surcharge d'opérateurs et la gestion dynamique de mémoire, FORTRAN90 est bien connu pour la rapidité d'exécution des programmes dédiés. Toutes les simulations présentées dans ce chapitre ont été effectuées sur une machine disposant d'un processeur de 64 bits avec 8.00 GHz de fréquence, et d'une mémoire RAM de 8.00 Go.

Afin d'évaluer plus finement les performances des deux algorithmes implantés, un chargement en extension isotrope combinée avec un cisaillement simple est appliqué à trois monocristaux de fer (de type cubique centré). La cinématique de ce chargement, définie par le gradient de vitesse $\mathbf{g}$, est donnée par la relation suivante :

$$\mathbf{g} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & -0,5 & 0 \\ 0 & 0 & -0,5 \end{bmatrix} \left(s^{-1}\right) \tag{1.152}$$

Le pas de temps Δt est choisi constant durant le chargement et est fixé à $10^{-3}\,s$ tandis que le temps total est fixé à $1s$. Cela correspond à 1000 incréments de calcul.

Les orientations cristallographiques initiales de ces trois monocristaux sont données dans le Tab. 1.1.

Orientation initiale du monocristal	φ_1	φ_g	φ_2
# 1	30°	0°	0°
# 2	0°	30°	0°
# 3	39°	43°	41°

Tab. 1.1. Orientations cristallographiques initiales des trois monocristaux de fer.

Pour ces simulations, l'élasticité est supposée isotrope et la loi d'écrouissage utilisée est celle de type puissance donnée par la relation (1.20). Les paramètres d'élasticité et d'écrouissage sont donnés dans le Tab. 1.2. Les neuf paramètres ($a_1, a_2, ..., a_9$) définissant la matrice d'interaction $\mathbf{a}$ sont donnés dans le Tab. 1.3 (Lorrain, 2005). Plus de détails sur la définition de cette matrice d'interaction sont donnés dans l'Annexe A.

Élasticité		**Écrouissage**		
λ	μ	h_0	τ_0	n_e
121,15 GPa	80,77 GPa	390 MPa	40 MPa	0,35

Tab. 1.2. Paramètres d'élasticité et d'écrouissage.

a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7	a_8	a_9
1	1	1,15	1,15	1,05	1,1025	1,3	1,3	1,495

Tab. 1.3. Paramètres définissant la matrice d'interaction d'écrouissage $\mathbf{a}$.

1.5.1 Comparaison des algorithmes relatifs au critère classique de Schmid

Pour chacun des trois monocristaux, nous nous intéressons dans un premier temps aux évolutions des variables mécaniques suivantes :

- Les vitesses de glissement des systèmes actifs.
- Les glissements cumulés des systèmes actifs.
- Les cissions critiques des systèmes actifs.
- La contrainte équivalente de von Mises.

Ces quantités sont déterminées en utilisant les deux algorithmes précédemment détaillés (l'algorithme de retour radial et l'algorithme évolutif) dans le cadre du critère classique de Schmid. Les évolutions de ces différentes variables sont tracées en fonction de la composante ε_{11} de la déformation logarithmique.

Dans un second temps, nous comparons les performances de ces algorithmes en termes de nombre d'itérations et de temps de calcul.

Les Figs. 1.3 à 1.5 montrent l'évolution des différentes variables au cours de la déformation pour les trois monocristaux définis par les orientations cristallographiques du Tab. 1.1. Sur la Fig. 1.3(a), on remarque qu'avec une orientation initiale de (30°, 0°, 0°), on obtient en tout six systèmes qui s'activent durant la déformation, en l'occurrence les systèmes {14, 18, 27, 32, 36, 45}. En effet, au tout début de la déformation, les systèmes 18, 27, 32, 36 et 45 sont activés, puis le système 27 se désactive (quand la valeur de la déformation logarithmique ε_{11} atteint 0,12) pour laisser place au système 14 (qui s'active lorsque $\varepsilon_{11} = 0{,}15$). Par ailleurs, on remarque que même si l'activité des systèmes déterminée par les deux algorithmes est la même, les vitesses de glissement calculées sont légèrement différentes au début de la déformation surtout pour le cas des systèmes 32, 36 et 45. Par contre, les vitesses sont pratiquement identiques pour des déformations importantes où l'activité des systèmes semble stable. La Fig. 1.3(b) montre l'évolution des glissements cumulés des systèmes actifs. On peut remarquer que l'algorithme évolutif et l'algorithme de retour radial prédisent exactement les mêmes valeurs. Sur la Fig. 1.3(c), seules les évolutions des cissions critiques des systèmes {14, 18, 27, 32, 36} ont été tracées car le système 45 a une évolution identique au système 18. Nous faisons le même constat que sur la Fig. 1.3(b), à savoir que les deux algorithmes prédisent les mêmes valeurs. Il en est de même pour la contrainte équivalente de von Mises présentée sur la Fig. 1.3(d). Similairement à la Fig. 1.3(a), la Fig. 1.4(a) montre l'évolution des vitesses de glissement des systèmes actifs correspondant à l'orientation initiale de (0°, 30°, 0°). Au total, huit systèmes de

glissement sont actifs pour ce monocristal : {2, 4, 20, 22, 24, 31, 33, 35}. L'activité des systèmes de glissement correspondant à cette orientation cristallographique est cette fois-ci très variable. En effet, au début de la déformation, les systèmes {2, 24, 31, 35} s'activent mais on observe une désactivation précoce du système 31 lorsque la déformation logarithmique ε_{11} vaut 10^{-3}. Le système 4 s'active par la suite à $\varepsilon_{11} = 0{,}04$ tandis que le système 35 se désactive à $\varepsilon_{11} = 0{,}05$. Le système 20 quant à lui s'active à $\varepsilon_{11} = 0{,}06$ et le système 24 se désactive à $\varepsilon_{11} = 0{,}215$. À $\varepsilon_{11} = 0{,}26$ c'est au tour du système 22 de s'activer. À partir de cet instant, les systèmes actifs sont {2, 4, 20, 22 ,33}, avec une activité de ces systèmes qui reste constante durant le reste de la déformation. Il faut remarquer que comme dans le cas du monocristal # 1, cinq systèmes accommodent la déformation plastique lorsque l'activité des systèmes se stabilise. Ce résultat confirme l'hypothèse de Taylor (1938). La Fig. 1.4(b) montre l'évolution des glissements cumulés des différents systèmes actifs en fonction de la déformation logarithmique ε_{11}. La Fig. 1.4(c) montre l'évolution des cissions critiques des mêmes systèmes actifs en fonction de ε_{11}. Comme pour le cas de la Fig. 1.3(c), seuls les systèmes actifs ayant des évolutions des cissions critiques distinctes y sont représentés. En effet, les cissions critiques des systèmes 2, 31, et 33 sont les mêmes. C'est également le cas des systèmes 4, 22 et 24. Les résultats des Figs. 1.4(b) et 1.4(c) montrent que les deux algorithmes permettent d'obtenir exactement les mêmes prédictions. Sur la Fig. 1.4(d) outre la conformité des résultats obtenus avec les deux algorithmes, on remarque que le changement d'activité des systèmes (qui se produit à $\varepsilon_{11} = 0{,}26$) peut engendrer des points d'inflexion sur l'évolution de la contrainte équivalente de von Mises. La Fig. 1.5(a) montre que le chargement appliqué au monocristal # 3, d'orientation cristallographique (39°, 43°, 41°), permet d'activer huit systèmes cristallographiques à savoir {9, 26, 34, 39, 40, 44, 45, 46}. Au début de la déformation, on peut remarquer que cinq systèmes sont actifs, en l'occurrence les systèmes 9, 26, 34, 39 et 44. Par la suite, le système 9 se désactive à $\varepsilon_{11} = 0{,}14$ pour être remplacé par le système 46 qui s'active à $\varepsilon_{11} = 0{,}16$. On remarque en outre deux changements significatifs d'activité de système. Le premier correspond à $\varepsilon_{11} = 0{,}18$ où le système 44 se désactive pour laisser place au système 40. Le second changement correspond à $\varepsilon_{11} = 0{,}62$ où le système 46 se désactive pour laisser place au système 45. Ces changements d'activité des systèmes ont en revanche peu d'influence sur l'évolution de la contrainte comme en témoigne la Fig. 1.5(d). Par ailleurs, similairement aux Figs. 1.3(c) et 1.4(c), la Fig. 1.5(c) montre l'évolution des cissions critiques des systèmes de glissement représentatifs de l'ensemble des systèmes actifs. En effet l'évolution de la cission critique du système 26 est identique à celles des systèmes 9, 39, 44 et 45.

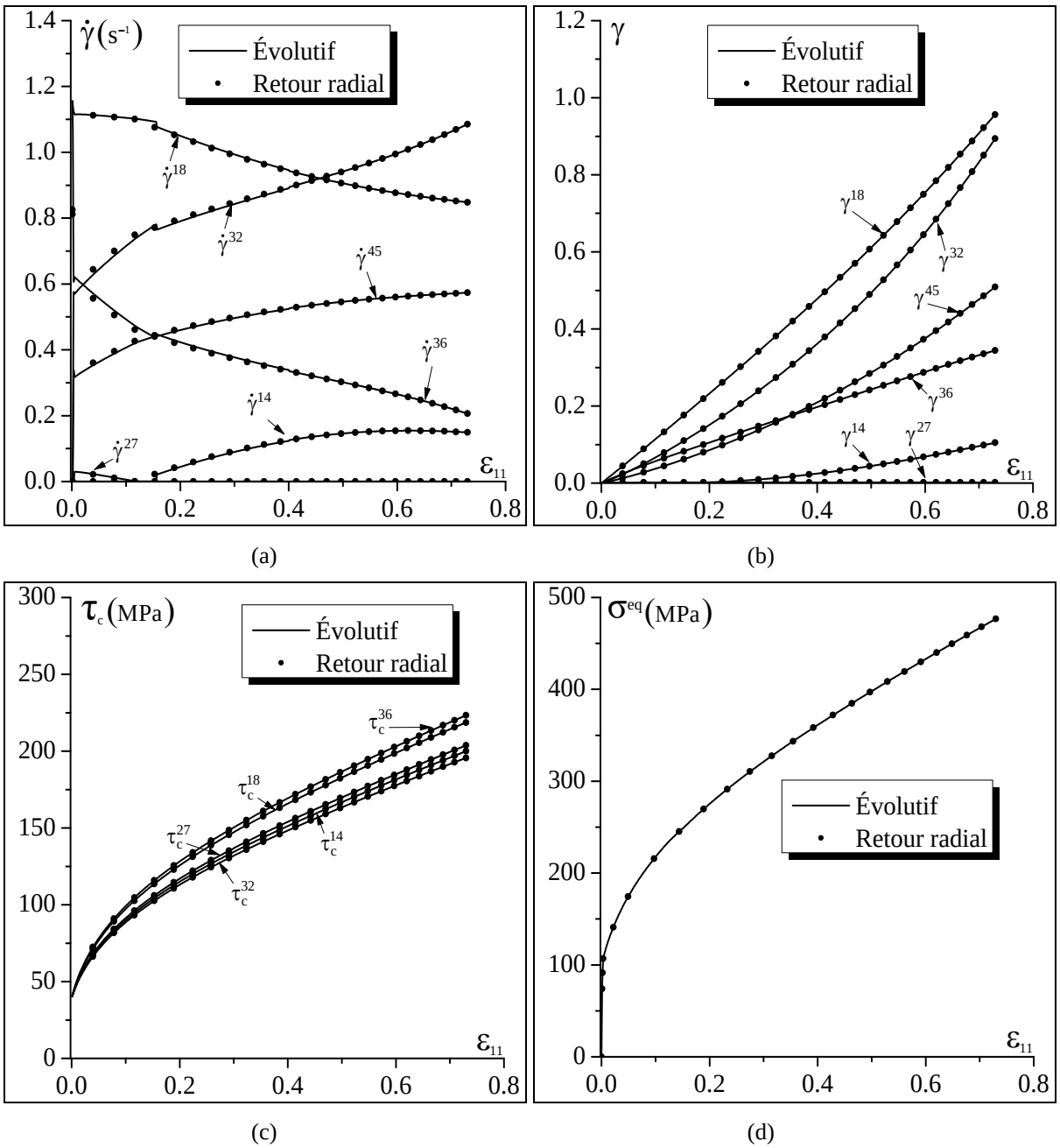


Fig. 1.3. Effet de l'algorithme d'intégration sur l'évolution des variables mécaniques relatives au monocristal # 1 : (a) vitesses de glissement des systèmes actifs ; (b) glissements cumulés des systèmes actifs ; (c) cissions critiques des systèmes actifs représentatifs ; (d) contrainte équivalente de von Mises.

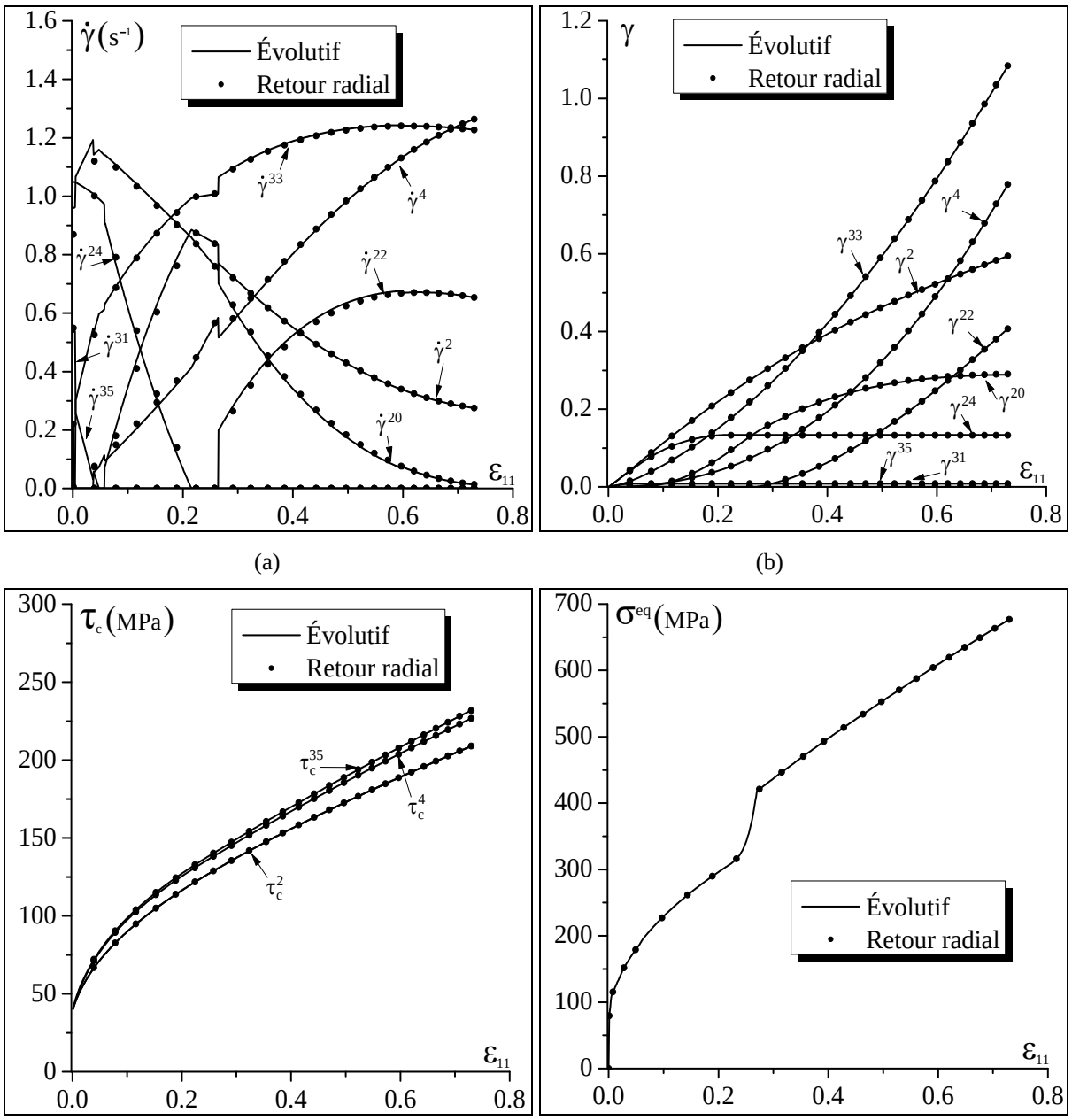


Fig. 1.4. Effet de l'algorithme d'intégration sur l'évolution des variables mécaniques relatives au monocristal # 2 : (a) vitesses de glissement des systèmes actifs ; (b) glissements cumulés des systèmes actifs ; (c) cissions critiques des systèmes actifs ; (d) contrainte équivalente de von Mises.

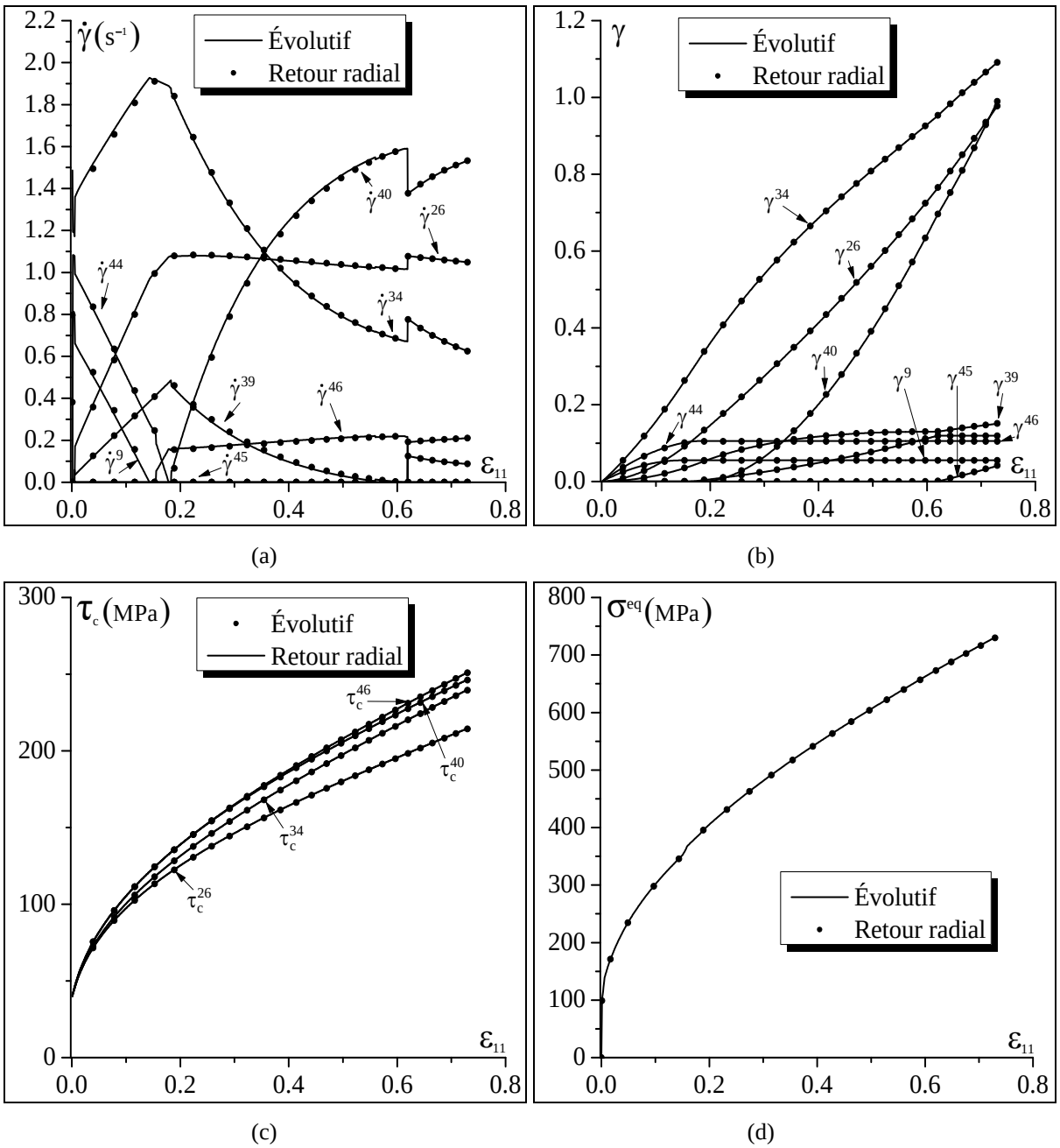


Fig. 1.5. Effet de l'algorithme d'intégration sur l'évolution des variables mécaniques relatives au monocristal # 3 : (a) vitesses de glissement des systèmes actifs ; (b) glissements cumulés des systèmes actifs ; (c) cission critique des systèmes actifs ; (d) contrainte équivalente de von Mises.

Par rapport aux trois orientations cristallographiques, on peut observer une légère différence des valeurs des vitesses de glissement calculées suivant les deux algorithmes d'intégration utilisés. Plus la déformation augmente, et plus l'écart entre les différentes vitesses de glissement diminue. Cependant, les amplitudes des glissements cumulés, des cissions critiques et de la contrainte de Cauchy sont quasiment les mêmes. En effet, lorsqu'on utilise l'algorithme évolutif, l'ensemble des systèmes actifs $\mathcal{A}$ et les vitesses de glissement correspondantes peuvent varier sur le pas de temps imposé, à travers des subdivisions de ce pas de temps en plusieurs sous-pas (voir l'équation (1.94)). Ces sous-pas de

temps correspondent à l'activation de nouveaux systèmes de glissement ou à la désactivation d'anciens systèmes déjà actifs. Ceci n'est pas le cas de l'algorithme de retour radial où l'ensemble des systèmes actifs ne change pas au cours du pas de temps imposé I^{Δ}. Les vitesses de glissement calculées par cet algorithme sont une sorte de moyenne de leurs homologues déterminées par l'algorithme évolutif sur le pas de temps imposé. La Fig. 1.6 illustre ce fait par une subdivision du pas de temps imposé Δt en trois sous-pas de temps ($\delta t^1, \delta t^2$ et δt^3) et par le vecteur vitesse de glissement (dont nous ne considérons ici que 2 composantes sur les 48 systèmes de glissement du cubique centré pour une illustration dans le plan). Pour le cas de l'algorithme évolutif, des numéros sont placés en indice du vecteur vitesse de glissement pour faire référence aux différents sous-pas de temps. Il faut souligner que lorsqu'il n'y a aucune subdivision du pas de temps imposé, les valeurs des vitesses de glissement calculées en utilisant l'algorithme évolutif coïncident naturellement avec celles déterminées par l'algorithme de retour radial. Cela explique le fait qu'au début du chargement, où l'activité des systèmes est extrêmement variable, on observe une légère différence entre les valeurs des vitesses de glissement calculées par les deux algorithmes et qu'en grandes déformations où l'activité des systèmes est stable et évolue très peu, on observe des valeurs quasi identiques (voir Figs. 1.3(a), 1.4(a) et 1.5(a)).

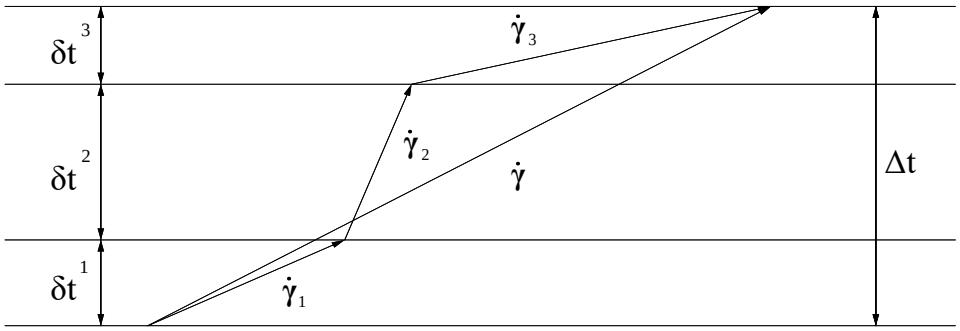


Fig. 1.6. Illustration schématique de la différence entre l'algorithme évolutif et l'algorithme de retour radial.

La Fig. 1.7 montre l'évolution des trois angles d'Euler de chacun des trois monocristaux dont les orientations initiales sont définies dans le Tab. 1.1. Nous rappelons que ces trois angles d'Euler définissent la matrice de rotation du réseau cristallographique par rapport à la configuration intermédiaire (confer relation (1.1)) et que l'évolution de cette matrice de rotation dépend du taux de rotation imposé et des vitesses de glissement des différents systèmes actifs, comme le montre la relation (1.58). Comme pour les autres variables mécaniques (glissements cumulés, cissions critiques, contrainte équivalente de von Mises), on remarque que les deux algorithmes d'intégration aboutissent à des résultats identiques en terme de l'évolution des angles d'Euler. On peut également remarquer une évolution significative des angles d'Euler au cours du chargement, illustrant ainsi une rotation importante du réseau cristallographique qui est une caractéristique des grandes transformations.

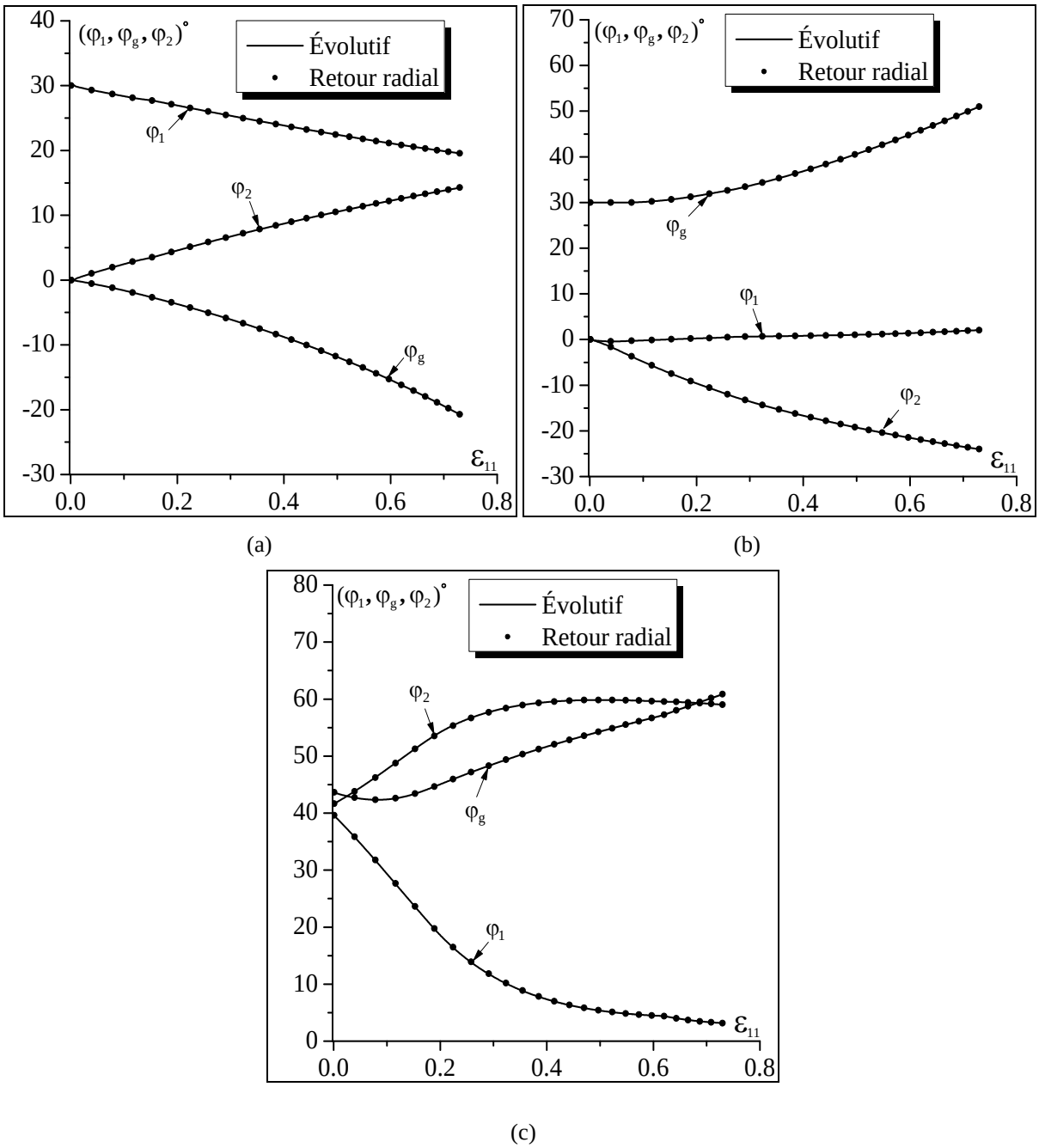
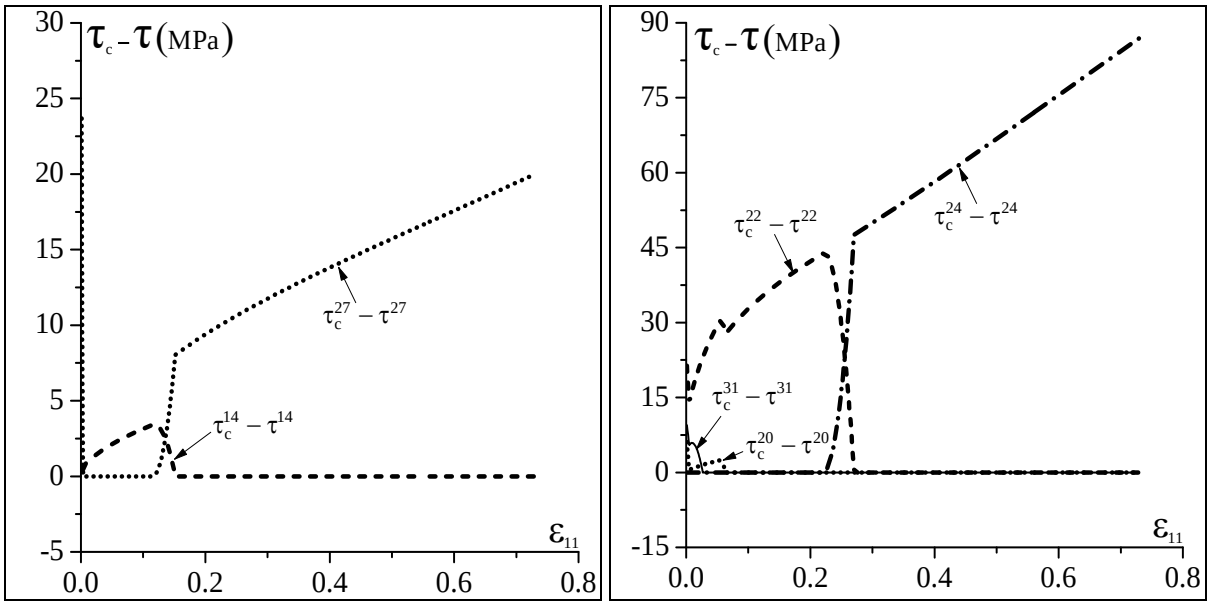


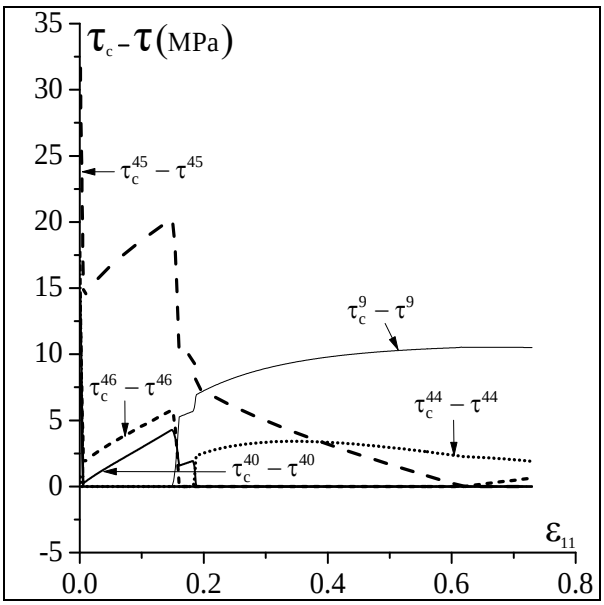
Fig. 1.7. Effet de l'algorithme d'intégration sur l'évolution des trois angles d'Euler définissant l'orientation cristallographique : (a) monocristal # 1 ; (b) monocristal # 2 ; (c) monocristal # 3.

Les Figs. 1.8(a), 1.8(b) et 1.8(c) montrent l'écart entre les cissions critiques et résolues des systèmes actifs pour chacune des trois orientations cristallographiques du Tab. 1.1. Pour ces résultats, aucune distinction n'est faite entre les deux algorithmes d'intégration utilisés, étant donné que les résultats prédits par ces derniers sont identiques. Par ailleurs, il faut rappeler qu'une condition nécessaire au glissement cristallographique d'un système est l'égalité entre sa cission résolue et sa cission critique. Sur les Figs. 1.8(a), 1.8(b) et 1.8(c), seuls les systèmes qui changent d'activité au cours du chargement sont représentés. Ces systèmes sont ceux qui étaient initialement inactifs et qui s'activent par la suite,

ou à l'inverse étaient initialement actifs et finissent par devenir inactifs. Sur la Fig. 1.8(a), on observe que la différence entre les cissions critique et résolue du système 27 est égale à 23,67 MPa au premier incrément. Puis cette différence diminue très rapidement pour finalement s'annuler au tout début de la déformation plastique, marquant ainsi l'activation de ce système. Pour le système 14, la différence entre les cissions critique et résolue est très faible à la fin du premier incrément. Elle est précisément de 0,68 MPa. Cependant, on observe sur la Fig. 1.3(a) que la vitesse de glissement de ce système est nulle. Cela illustre bien le fait qu'avec le critère classique de Schmid, tous les systèmes potentiellement actifs n'ont pas forcément une vitesse de glissement positive, contrairement au critère régularisé de Schmid. Par la suite, la différence entre les cissions critique et résolue du système 14 tend à augmenter au début de la déformation, confirmant ainsi la non-activation de ce système. Par ailleurs, l'évolution des deux courbes correspondant respectivement aux systèmes 27 et 14 montre une inversion de l'activité des systèmes. En effet, la cission critique du système 27 devient largement supérieure à sa cission résolue, tandis que pour le système 14 l'écart entre les cissions critique et résolue devient nul. Cet instant correspond à une déformation $\varepsilon_{11} = 0{,}15$ qui est la même valeur que celle observée lors du changement des vitesses de glissement à la Fig. 1.3(a). Sur les Figs. 1.8(b) et 1.8(c), le constat est le même que sur la Fig. 1.8(a), à savoir une concordance de l'évolution de la différence entre les cissions critiques et résolues des systèmes actifs avec l'évolution de leurs vitesses de glissement illustrée respectivement sur les Figs. 1.4(a) et 1.5(a).



(a) (b)



(c)

Fig. 1.8. Évolution de la différence entre les cissions critiques et les cissions résolues des systèmes actifs : (a) monocristal # 1 ; (b) monocristal # 2 ; (c) monocristal # 3.

Dans la suite, nous allons comparer les performances des deux algorithmes proposés. Pour cela, nous imposons le chargement défini par la relation (1.152) dans trois situations correspondant à trois pas de temps différents : 10^{-3} s , 5×10^{-3} s et 10^{-2} s . La Fig. 1.9(a) montre pour chacun des trois pas de temps mentionnés plus haut, l'évolution du nombre de systèmes potentiellement actifs ($\mathrm{Card}(\mathcal{P})$) durant la déformation. On remarque qu'avec l'algorithme évolutif, la valeur de $\mathrm{Card}(\mathcal{P})$ est indépendante du pas de temps imposé. Cela se justifie par la définition de l'ensemble des systèmes potentiellement actifs $\mathcal{P}$ qui est indépendante de la longueur du pas de temps dans le cadre de cet algorithme. En revanche, pour l'algorithme de retour radial, on remarque que plus le pas de temps augmente, plus la valeur de $\mathrm{Card}(\mathcal{P})$ est élevée. En effet, avec l'algorithme de retour radial, un système est potentiellement actif si la valeur de sa cission résolue "trial" est supérieure à la valeur de sa cission critique initiale (comme l'illustre l'équation (1.71)). Cette cission résolue "trial" est fonction du pas de temps imposé : plus ce dernier est important, plus la cission résolue "trial" est grande. Par conséquent, les systèmes ayant une cission résolue "trial" qui dépasse la cission critique initiale sont beaucoup plus nombreux lorsqu'on augmente le pas de temps. Les Figs. 1.9(b), 1.9(c) et 1.9(d) montrent l'évolution du nombre d'itérations nécessaires au calcul des vitesses de glissement en fonction de la déformation logarithmique ε_{11}. Pour le cas de l'algorithme évolutif, il faut préciser que lorsque plusieurs sous-combinaisons de $\mathcal{P}$ sont utilisées dans l'incrément courant pour calculer les vitesses de glissement (voir la Section 1.3.1.2.3), le nombre d'itérations est égal à la somme du nombre de sous-combinaisons de $\mathcal{P}$ utilisées. En effet, sur chaque subdivision du pas de temps imposé, une ou

plusieurs combinaisons de l'ensemble des systèmes potentiellement actifs sont testées afin d'obtenir la convergence du calcul des vitesses de glissement. Pour le cas de l'algorithme de retour radial, ce nombre est égal au nombre d'itérations nécessaires pour la convergence de la procédure de Newton–Raphson utilisée pour la résolution du système (1.74). Dans les situations où le pas de temps initialement imposé doit être divisé en plusieurs sous-pas, pour remédier à la non-convergence de la méthode de Newton–Raphson, on additionne les itérations respectives de ces sous-pas. Sur les Figs. 1.9(b), 1.9(c) et 1.9(d), deux observations peuvent être faites : d'une part, le nombre d'itérations nécessaires au calcul des vitesses de glissement est beaucoup moins élevé lorsqu'on utilise l'algorithme évolutif que lorsqu'on utilise l'algorithme de retour radial et le rapport moyen de ces deux nombres est d'environ 1/4. D'autre part, on observe que le nombre d'itérations augmente avec le pas de temps imposé. Une corrélation peut ainsi être faite entre le nombre de systèmes potentiellement actifs et le nombre d'itérations nécessaires au calcul des vitesses de glissement, surtout pour le cas de l'algorithme de retour radial : plus le nombre de systèmes potentiellement actifs est élevé, plus le nombre d'itérations nécessaires au calcul des vitesses de glissement augmente. Cette corrélation apparaît d'autant plus évidente lorsqu'on considère que la complexité du système d'équations non-linéaires (1.74) augmente avec sa taille. On remarque par ailleurs que pour le cas de l'algorithme de retour radial, le nombre d'itérations est très élevé au début de la déformation : il est de 57 au premier incrément pour un pas de temps Δt de $10^{-3}\,\mathrm{s}$ (sur la Fig. 1.9(b)), de 306 pour un pas de temps Δt de $5\times10^{-3}\,\mathrm{s}$ (sur la Fig. 1.9(c)), et de 378 pour un pas de temps de $10^{-2}\,\mathrm{s}$ (sur la Fig. 1.9(d)). En effet au début de la déformation, parmi les nombreux systèmes qui sont potentiellement actifs, très peu ont une vitesse de glissement non nulle. Le nombre d'itérations serait largement réduit si l'on restreignait l'ensemble des systèmes potentiellement actifs à ces systèmes uniquement. Lorsque la déformation augmente, l'écart entre le nombre de systèmes potentiellement actifs et le nombre de systèmes effectivement actifs devient relativement faible, ce qui fait ainsi diminuer sensiblement le nombre d'itérations. Il faut également remarquer que pour l'algorithme évolutif, le nombre d'itérations n'est jamais supérieur à 10. C'est bien la preuve que la procédure de détermination itérative de l'ensemble $\mathcal{A}$ détaillée dans l'Étape 1 de la Section 1.3.1.2.3 est très efficace.

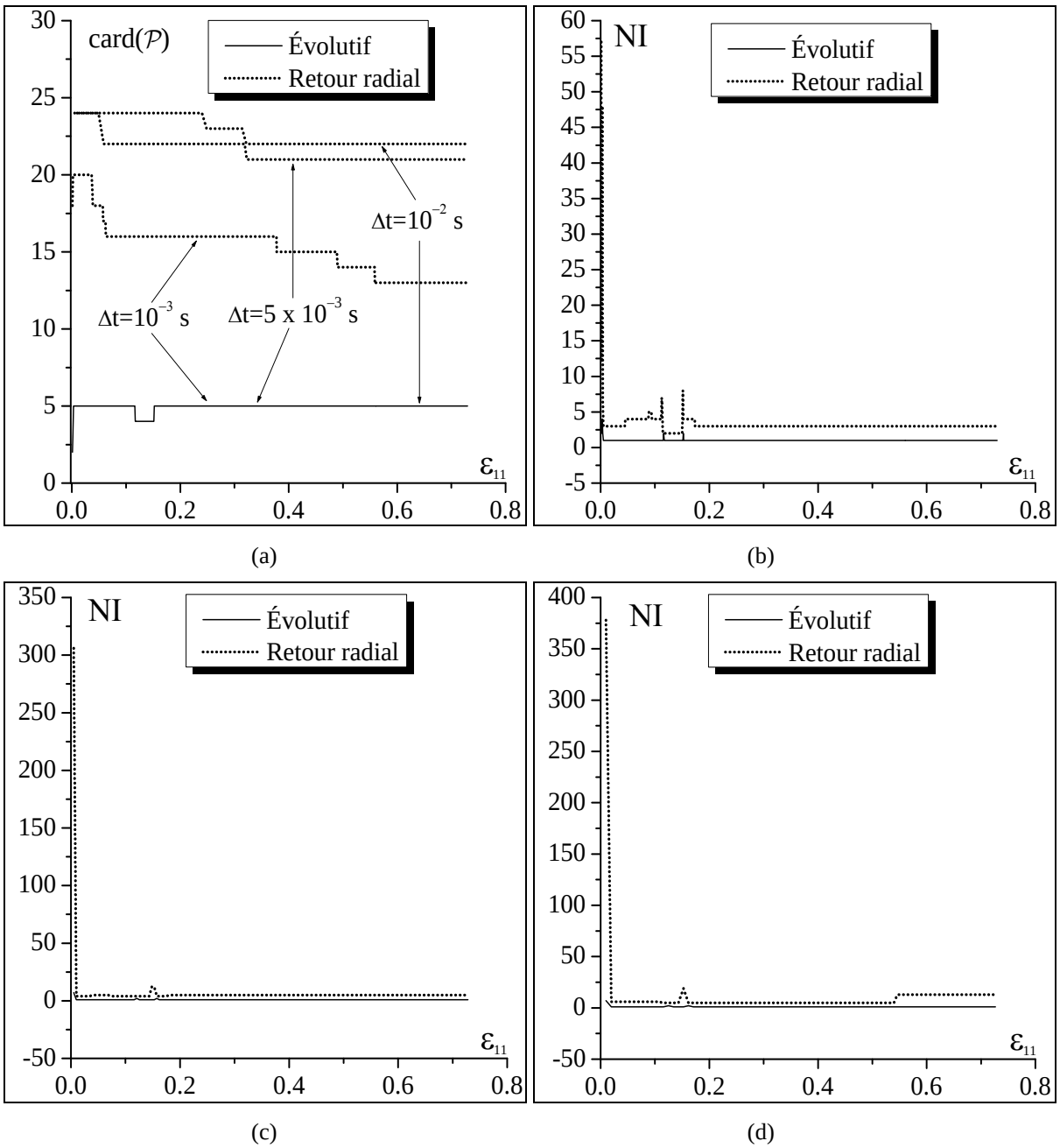


Fig. 1.9. Étude comparative de la performance de deux algorithmes développés (monocristal # 1) : (a) Cardinal de $\mathcal{P}$; (b) nombre d'itérations avec $\Delta t = 10^{-3}$ s ; (c) nombre d'itérations avec $\Delta t = 5\times10^{-3}$ s ; (d) nombre d'itérations avec $\Delta t = 10^{-2}$ s.

Sur la Fig. 1.10 relative au monocristal # 2, on observe globalement les mêmes tendances que celles observées sur la Fig. 1.9. Sur la Fig. 1.10(a), le nombre de systèmes potentiellement actifs déterminé par l'algorithme de retour radial atteint sa valeur maximale qui est de 24 (avec une structure cristallographique de type cubique centré) pour des pas de temps de 5×10^{-3} s et 10^{-2} s. Avec l'algorithme évolutif, le nombre de systèmes potentiellement actifs reste égal au nombre de systèmes actifs qui est égal à 5. Par ailleurs, avec l'algorithme de retour radial, au début de la déformation le

nombre d'itérations est de 142 pour un pas de temps de 10^{-3} s (Fig. 1.10(b)), de 435 pour un pas de temps de 5×10^{-3} s (Fig. 1.10(c)), et de 570 pour un pas de temps de 10^{-2} s (Fig. 1.10(d)).

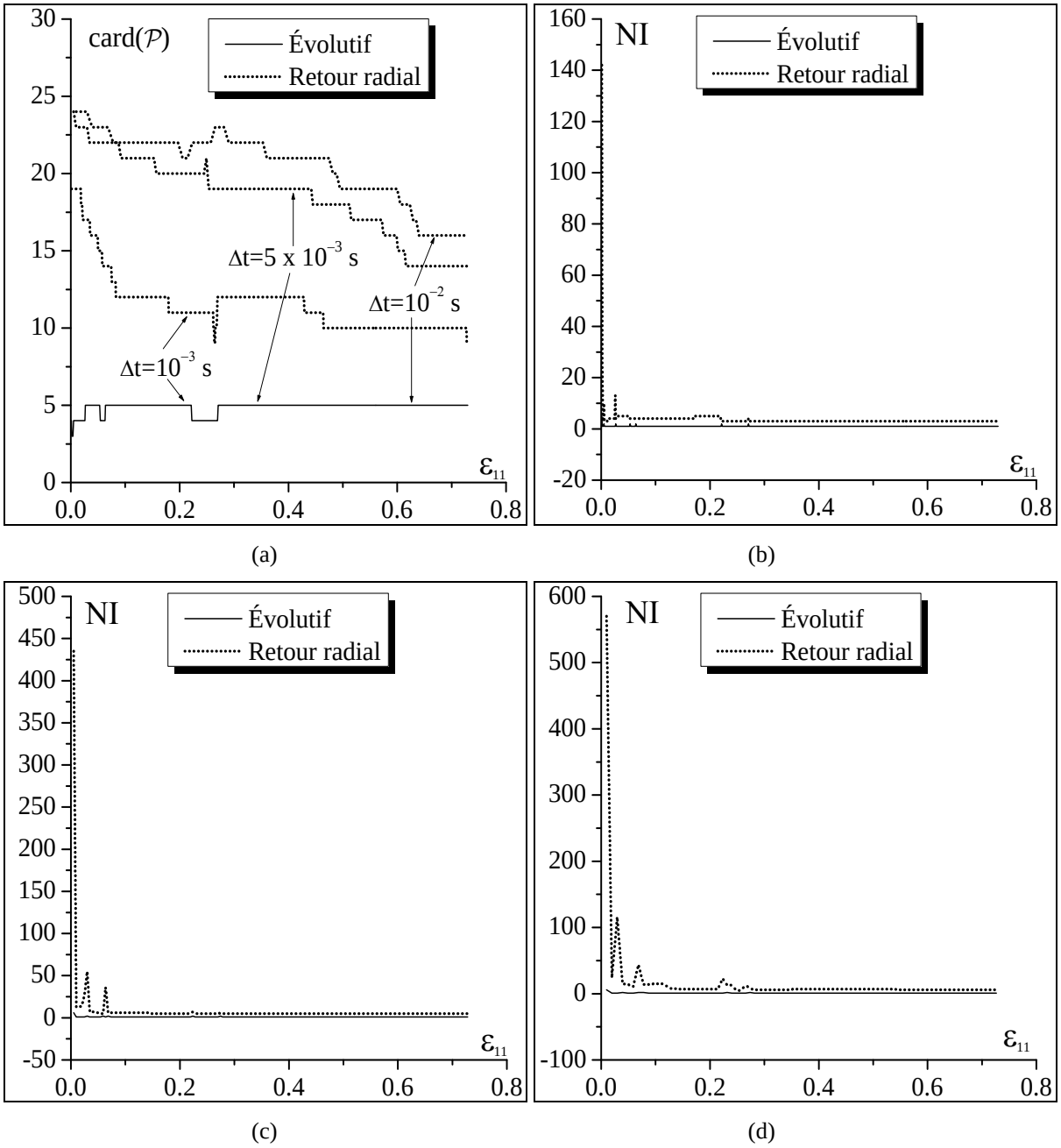


Fig. 1.10. Étude comparative de la performance des deux algorithmes développés (monocristal # 2): (a) Cardinal de $\mathcal{P}$; (b) nombre d'itérations avec $\Delta t = 10^{-3}$ s ; (c) nombre d'itérations avec $\Delta t = 5\times10^{-3}$ s ; (d) nombre d'itérations avec $\Delta t = 10^{-2}$ s .

Les résultats relatifs au monocristal # 3 sont presentés sur la Fig. 1.11. On observe une légère différence par rapport aux deux autres monocristaux. En effet, en ce qui concerne l'algorithme de retour radial, quel que soit le pas de temps imposé, on note un saut important du nombre d'itérations

correspondant à un changement d'activité des systèmes détecté à $\varepsilon_{11} = 0,62$ (voir la Fig. 1.5(a)). Au delà des premiers incréments, le cas le plus extrême est rencontré avec le pas de temps de 10^{-3} s (Fig. 1.11(b)) où le saut atteint la valeur de 66 itérations.

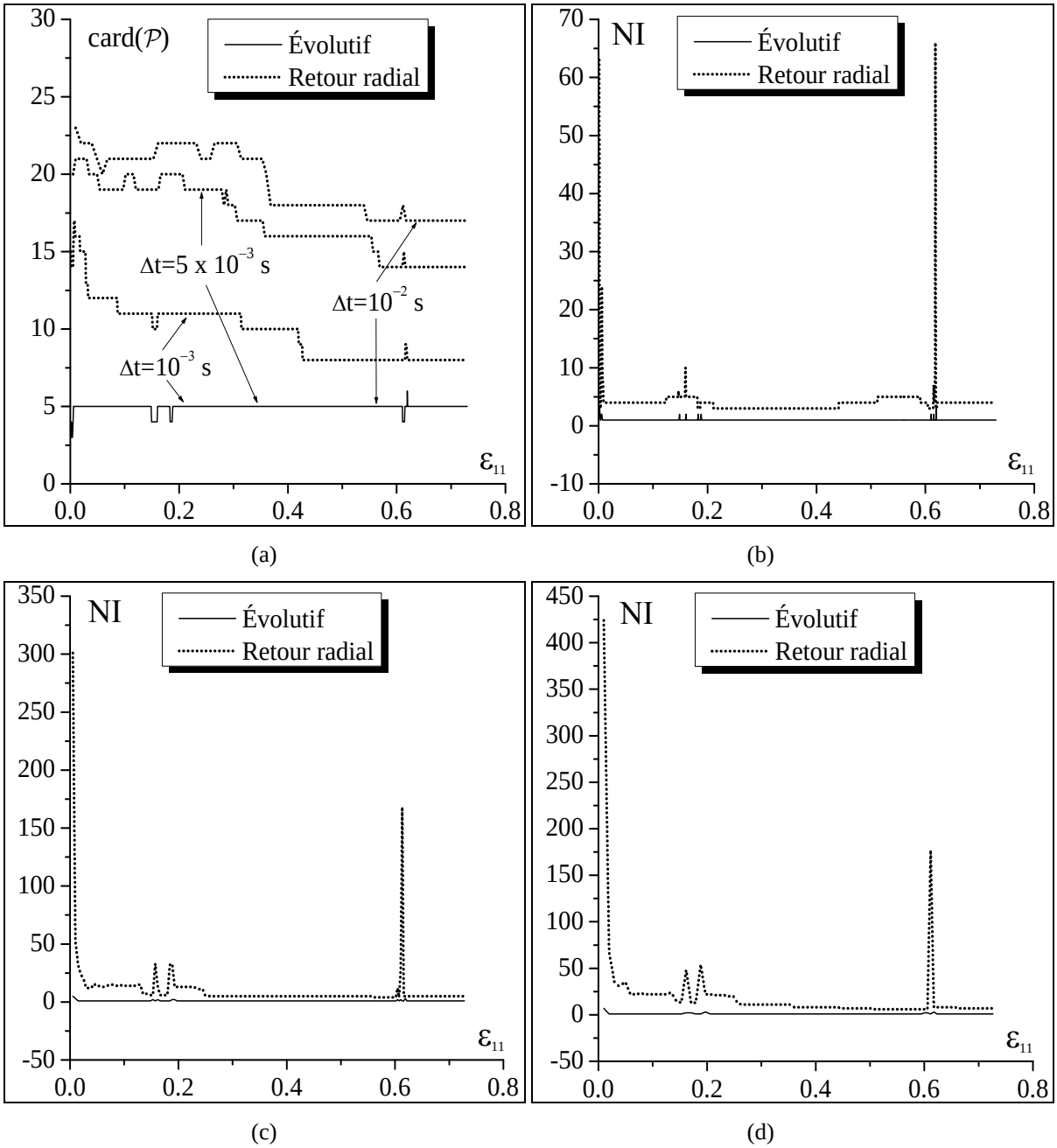


Fig. 1.11. Étude comparative de la performance des deux algorithmes développés (monocristal # 3) : (a) Cardinal de $\mathcal{P}$; (b) nombre d'itérations avec $\Delta t = 10^{-3}$ s ; (c) nombre d'itérations avec $\Delta t = 5 \times 10^{-3}$ s ; (d) nombre d'itérations avec $\Delta t = 10^{-2}$ s.

Au vu des résultats précédents, il est clair que l'algorithme évolutif est beaucoup plus performant que l'algorithme de retour radial. Cette performance se justifie par le très faible nombre d'itérations requis

pour le calcul des vitesses de glissement. Elle peut également être illustrée par la comparaison des temps de calcul nécessaires pour l'exécution de chacun des deux algorithmes (donnée dans le Tab. 1.4).

	Retour radial	Évolutif
Monocristal # 1	14,13 s	3,62 s
Monocristal # 2	13,94 s	4,29 s
Monocristal # 3	14,23 s	5,67 s

Tab. 1.4. Étude comparative des temps de calcul nécessaires pour l'exécution des deux algorithmes développés.

1.5.2 Comparaison entre la forme classique et la forme régularisée du critère de Schmid

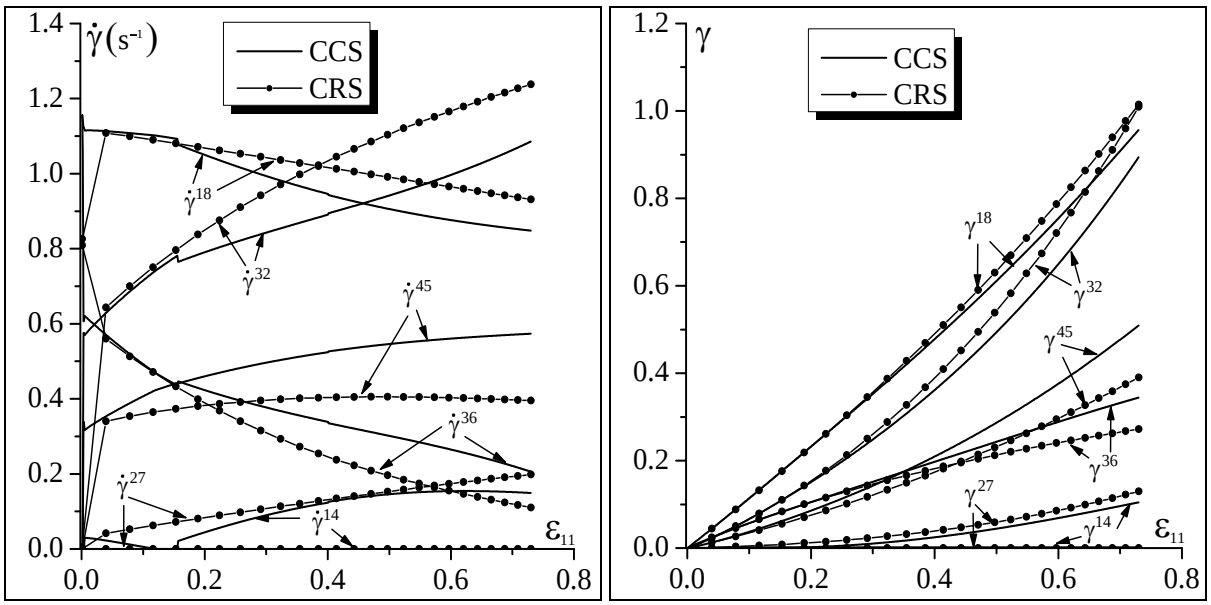
Il a été démontré dans la Section 1.5.1 que l'algorithme évolutif est bien plus performant que l'algorithme de retour radial pour l'intégration des relations constitutives relatives au critère classique de Schmid. Par conséquent, nous avons retenu l'algorithme évolutif pour intégrer les équations constitutives relatives à la forme régularisée du critère de Schmid. Sauf mention contraire, cet algorithme sera utilisé comme algorithme principal dans toute la suite de ce manuscrit.

Dans cette section, les résultats numériques obtenus en utilisant la forme classique et la forme régularisée du critère de Schmid seront comparés. Dans toutes les figures de cette section, les acronymes CCS et CRS seront utilisés pour désigner respectivement le critère classique de Schmid et sa forme régularisée. Pour le modèle relatif au critère régularisé de Schmid (CRS), les simulations effectuées sont les mêmes que celles adoptées plus haut pour le modèle associé au critère classique de Schmid (CSS), ce qui correspond au chargement $\mathbf{g}$ donné par l'équation (1.152), aux orientations cristallographiques décrites dans le Tab. 1.1 et aux propriétés mécaniques fournies dans le Tab. 1.2. Le paramètre n déjà introduit dans l'équation (1.33) et qui caractérise l'arrondissement de la surface de charge est fixé à 500. Il sera démontré plus loin (voir Fig. 1.16) qu'il suffit d'une valeur de $n = 10$ pour que la surface de charge associée à la forme régularisée du critère de Schmid soit très proche de celle de la forme classique. La valeur de $n = 500$ qui est une valeur irréaliste au vu des temps de calcul requis, est simplement choisie pour pouvoir mener une comparaison intéressante entre les deux algorithmes. La Fig. 1.12 détaille les résultats relatifs au monocristal # 1. La Fig. 1.12(a) montre l'évolution des vitesses de glissement des différents systèmes actifs obtenues par application du CCS par rapport à celles de leurs homologues obtenues en utilisant le CRS. On peut observer qu'au début de la déformation, les vitesses de glissement des systèmes 18, 32 et 36 calculées à partir du CCS sont pratiquement les mêmes que celles déterminées par le CRS. Cependant, lorsque la déformation augmente, l'écart entre les différentes vitesses de glissement augmente sensiblement. Par ailleurs, pour les systèmes 14, 27 et 45, on remarque un écart important dès le début de la déformation. La Fig.

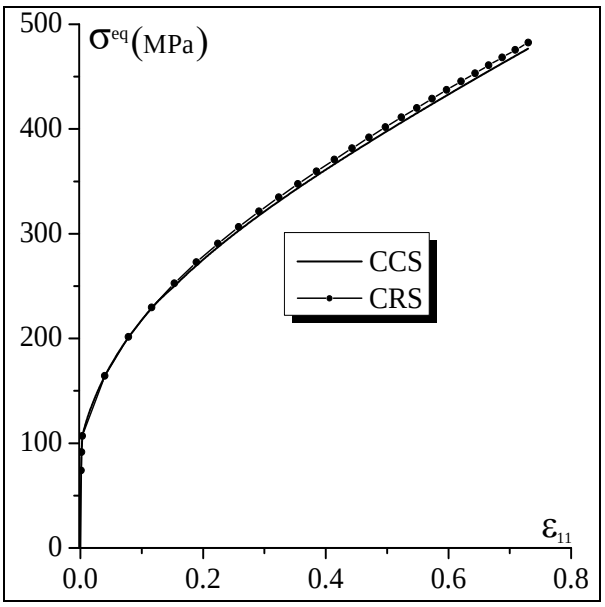
1.12(b) montre l'évolution des glissements cumulés sur chaque système de glissement en fonction de la déformation logarithmique. On observe la même tendance que celle de la Fig. 1.12(a). Cependant, il faut noter que par rapport à la Fig. 1.12(a), l'écart entre les courbes relatives aux deux critères utilisés n'est visible qu'à des niveaux de déformation beaucoup plus élevés. La Fig. 1.12(c) montre l'évolution de la contrainte équivalente de von Mises en fonction de la déformation logarithmique. Bien que les vitesses de glissement relatives aux deux critères soient nettement différentes, on n'observe qu'un léger écart entre les contraintes.

La Fig. 1.13 montre des résultats similaires à ceux de la Fig. 1.12 obtenus cette fois avec le monocristal # 2. Pour des raisons de clarté, seuls quelques systèmes de glissement sont représentés. En effet, du nombre total de systèmes actifs déterminés par le CCS, les systèmes 2, 22, 31 et 35 ont été retirés. Contrairement au cas de la Fig. 1.12(a), il apparaît que les vitesses de glissement varient fortement en fonction du critère d'écoulement utilisé et cela dès le début de la déformation. Sur la Fig. 1.13(b), on observe bien évidemment un écart du même type que celui de la Fig. 1.13(a). Sur la Fig. 1.13(c), il faut remarquer que similairement au cas du CCS, l'évolution de la contrainte admet un point d'inflexion correspondant à une variation brusque des valeurs des vitesses de glissement des différents systèmes lorsqu'on utilise le CRS. Néanmoins les points d'inflexion ne se produisent pas au même instant. Pour le critère classique de Schmid, nous rappelons que le point d'inflexion a lieu à $\varepsilon_{11} = 0{,}26$ alors que pour le critère régularisé de Schmid, il a lieu à $\varepsilon_{11} = 0{,}32$.

La Fig. 1.14 montre les résultats relatifs au monocristal # 3. Comme pour le cas précédent, seuls quelques systèmes actifs prédits par le CCS ont été conservés afin de comparer leurs vitesses de glissement à celles déterminées par le CRS. Dès les premiers incréments de chargement, on observe un écart très important des vitesses de glissement sur la Fig. 1.14(a). Il en est de même pour l'évolution des glissements cumulés des différents systèmes actifs. Au niveau de l'évolution de la contrainte équivalente de von Mises, on observe cependant une similitude entre les deux critères pour des niveaux de déformations allant de 0 à $\varepsilon_{11} = 0{,}15$ (voir la Fig. 1.14(c)).

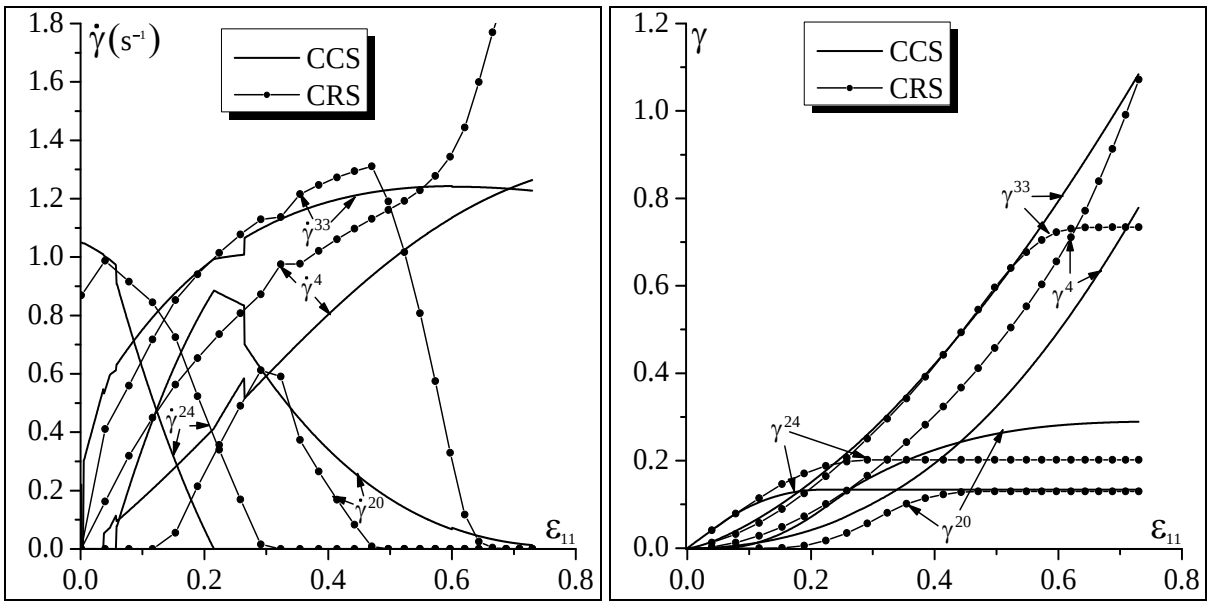


(a) (b)

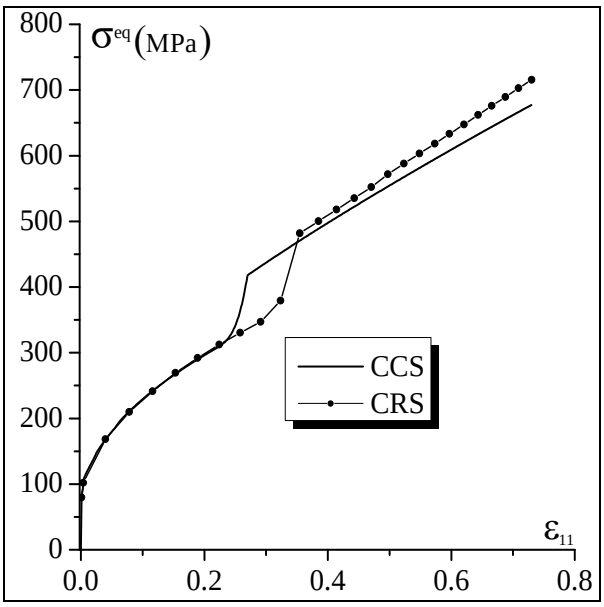


(c)

Fig. 1.12. Effet de la régularisation du critère de Schmid sur l'évolution des variables mécaniques relatives au monocristal # 1 : (a) vitesses de glissement des systèmes actifs ; (b) glissements cumulés des systèmes actifs ; (c) contrainte équivalente de von Mises.



(a) (b)



(c)

Fig. 1.13. Effet de la régularisation du critère de Schmid sur l'évolution des variables mécaniques relatives au monocristal # 2 : (a) vitesses de glissement des systèmes actifs ; (b) glissements cumulés des systèmes actifs ; (c) contrainte équivalente de von Mises.

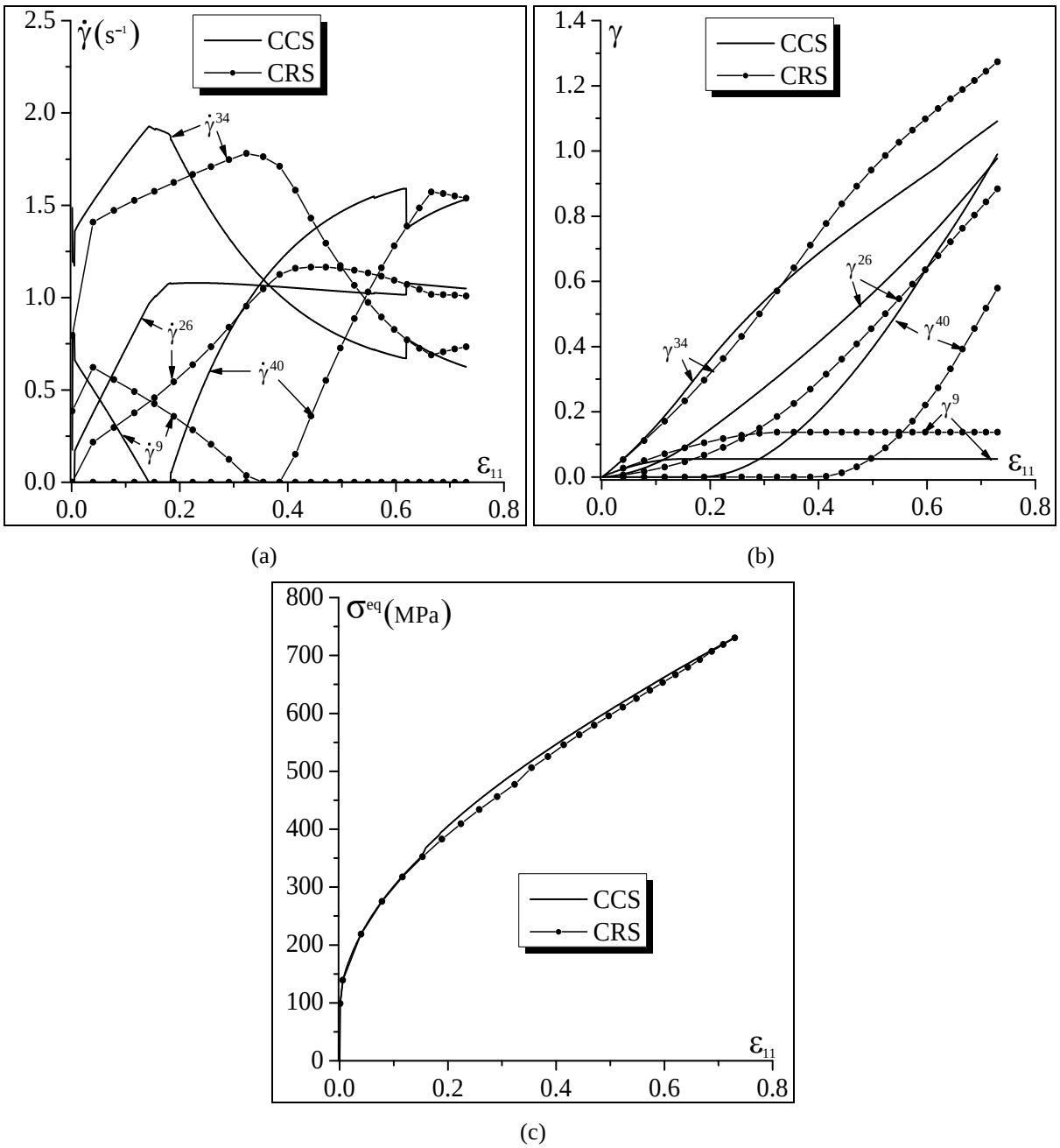
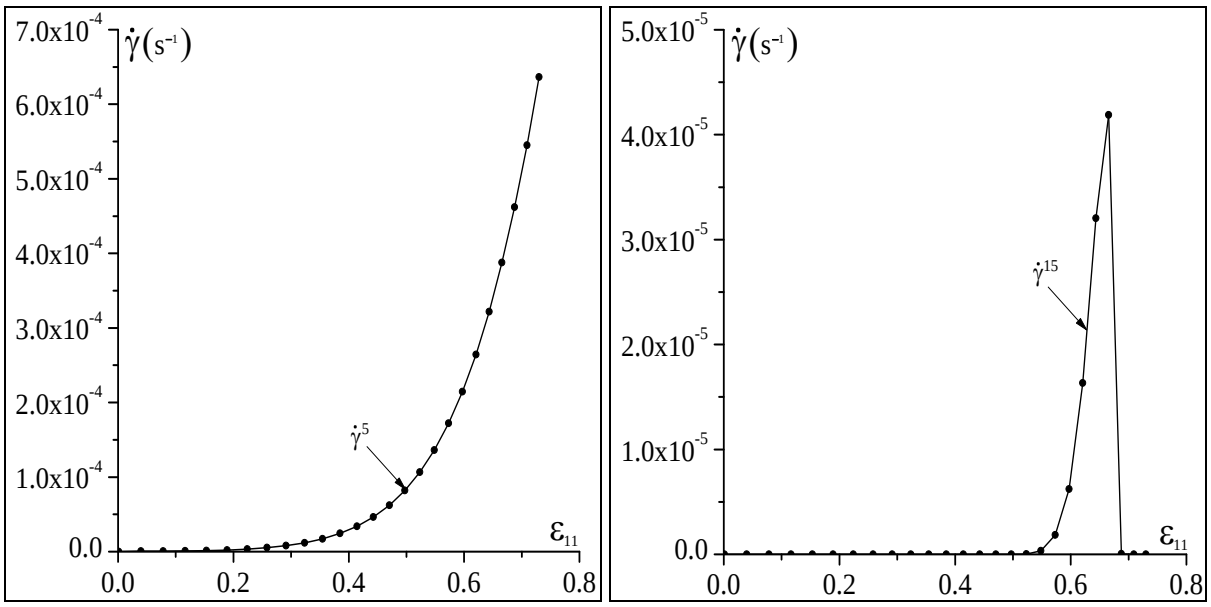


Fig. 1.14. Effet de la régularisation du critère de Schmid sur l'évolution des variables mécaniques relatives au monocristal # 3 : (a) vitesses de glissement des systèmes actifs ; (b) glissements cumulés des systèmes actifs ; (c) contrainte équivalente de von Mises.

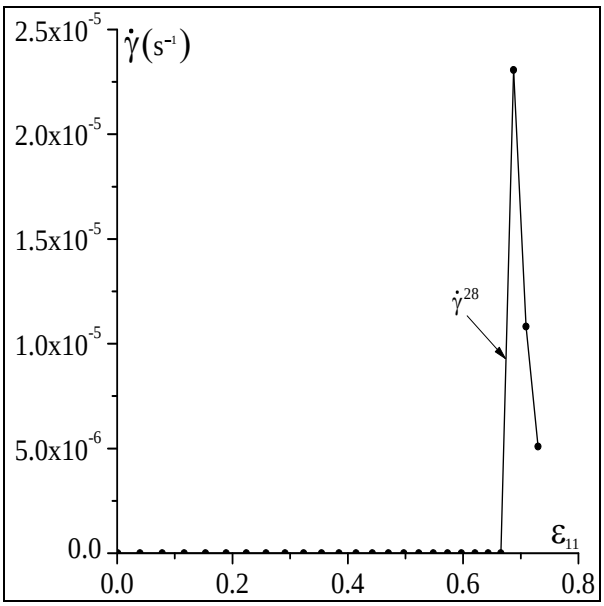
La Fig. 1.15 illustre l'évolution de l'activité des systèmes cristallographiques prédite par le CRS. En effet, cette figure montre l'évolution du maximum des vitesses de glissement sur l'ensemble des systèmes de glissement résiduels, pour chaque orientation cristallographique initiale donnée dans le Tab. 1.1 En effet, lorsqu'on utilise le CRS toutes les vitesses de glissement calculées sont strictement positives (comme indiqué dans la Section 1.2.3.2). Cependant, nous distinguons deux catégories de systèmes de glissement : ceux dont l'amplitude maximale de la vitesse de glissement est supérieure à $10^{-2}\,s^{-1}$ et que l'on peut qualifier de "systèmes actifs", et ceux dont l'amplitude maximale est

inférieure à $10^{-2}\,\mathrm{s}^{-1}$ et que l'on peut qualifier de "systèmes résiduels". Il faut préciser que $10^{-2}\,\mathrm{s}^{-1}$ est en moyenne l'ordre de grandeur minimal des vitesses de glissement des systèmes actifs déterminés par le CCS. Par ailleurs, les systèmes actifs déterminés avec le CCS sont exactement les mêmes que les "systèmes actifs" déterminés par le CRS, alors que les vitesses de glissement correspondantes sont parfois très différentes (comme illustré sur les Figs. 1.12(a), 1.13(a) et 1.14(a)). Ainsi, sur la Fig. 1.15(a), on peut remarquer qu'avec l'orientation du monocristal # 1, l'amplitude maximale des vitesses de glissement des systèmes résiduels est de $6,37\times10^{-4}\,\mathrm{s}^{-1}$ et elle correspond à l'amplitude du système 5. Sur la Fig. 1.15(b) (resp. Fig. 1.15(c)), on obtient une amplitude maximale de $4,2\times10^{-5}\,\mathrm{s}^{-1}$ (resp. $2,3\times10^{-5}\,\mathrm{s}^{-1}$) qui est relative au système 15 (resp. 28) du monocristal # 2 (resp. monocristal # 3). Dans ces trois cas, on remarque que les amplitudes des vitesses de glissement des systèmes résiduels sont négligeables (comparées aux vitesses de glissement des systèmes actifs) et peuvent être considérées comme n'ayant aucune influence sur le comportement du monocristal.

De toutes les simulations effectuées sur les monocristaux et qui visent à comparer le CCS au CRS, on peut conclure que la forme régularisée du critère de Schmid se distingue de sa forme standard par les valeurs des vitesses de glissement calculées. Cependant, au vu des très faibles valeurs des vitesses de glissement des systèmes résiduels, on peut raisonnablement affirmer que l'activité des systèmes est la même pour les deux formes du critère de Schmid. On peut également conclure que la contrainte calculée avec les deux critères n'est distincte que pour des niveaux de déformations importants (confer Figs. 1.12(c), 1.13(c) et 1.14(c)). Ces conclusions ne sont cependant valables que pour des valeurs assez élevées du paramètre d'arrondissement de la surface de charge n.



(a) (b)



(c)

Fig. 1.15. Évolution du maximum des vitesses de glissement des systèmes résiduels liés au CRS : (a) monocristal # 1 ; (b) monocristal # 2 ; (c) monocristal # 3.

L'impact de la régularisation du critère de Schmid sur la forme de la surface de charge est étudié dans la suite de cette section. Ainsi, deux valeurs différentes du paramètre de régularisation n sont utilisées dans cette étude, en l'occurence $n = 2$ et $n = 10$. Les résultats relatifs à cette étude sont donnés dans la Fig. 1.16, où les surfaces de charge obtenues à une déformation plastique équivalente (au sens de von Misès) de 0,05, sont présentées dans le plan $\sigma_{11} - \sigma_{22}$. Pour déterminer la forme de chaque surface de charge, quatre chargements diagonaux et incompressibles sont imposés au monocristal. Chaque chargement est défini par le gradient de vitesse associé. Ainsi, nous disposons de quatre gradients de vitesses différents : $\mathbf{g}_1, -\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, -\mathbf{g}_2$ où $\mathbf{g}_1$ et $\mathbf{g}_2$ sont définis par les expressions suivantes :

$$\mathbf{g}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \rho & 0 \\ 0 & 0 & -(1+\rho) \end{bmatrix} \left(s^{-1}\right) \quad ; \quad \mathbf{g}_2 = \begin{bmatrix} \rho & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -(1+\rho) \end{bmatrix} \left(s^{-1}\right) \tag{1.153}$$

Pour balayer les différentes directions de chargement et déterminer ainsi les différents points de la surface de charge dans le plan $\sigma_{11} - \sigma_{22}$, le paramètre ρ est varié entre -1 et 1 avec des pas $\Delta\rho$ de 0,02.

Conformément aux attentes, on remarque sur la Fig. 1.16 que les surfaces de charge déterminées par le CCS sont composées d'arêtes (qui sont en l'occurrence au nombre de 6), symétriques par rapport à l'origine et formant des coins aigus (ou points de vertex). Ces points de vertex sont dus au caractère discret du CCS. Comme nous le montrerons sur la Fig. 1.17, ils entrainent une réduction importante des composantes de cisaillement du module tangent. La forme régularisée du critère de Schmid permet d'obtenir quant à elle des surfaces de charge aux coins parfaitement arrondis lorsque la valeur de n

est faible (en l'occurrence $n = 2$) et des surfaces se rapprochant de celles déterminées par le critère classique de Schmid lorsque la valeur de n augmente (en l'occurrence $n = 10$). Cette tendance confirme bien l'hypothèse selon laquelle n représente le paramètre d'arrondissement de la surface de charge lorsqu'on utilise le CRS.

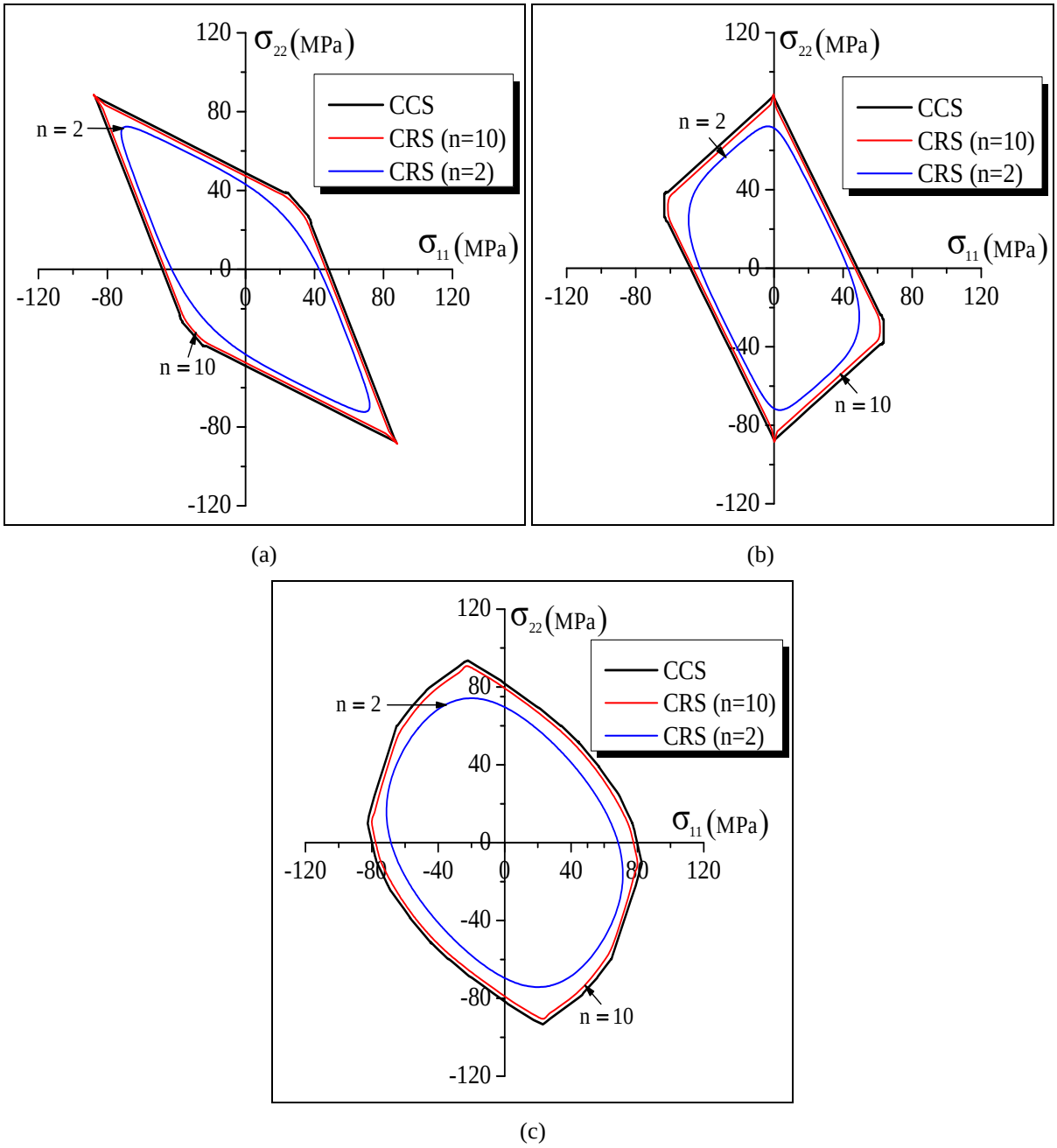
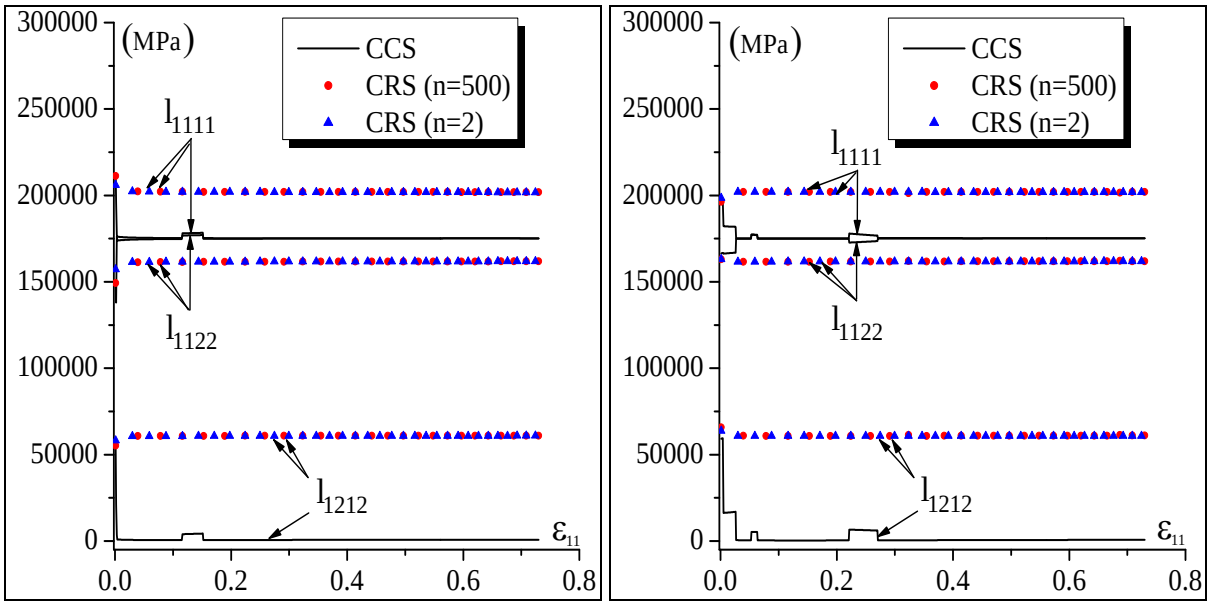


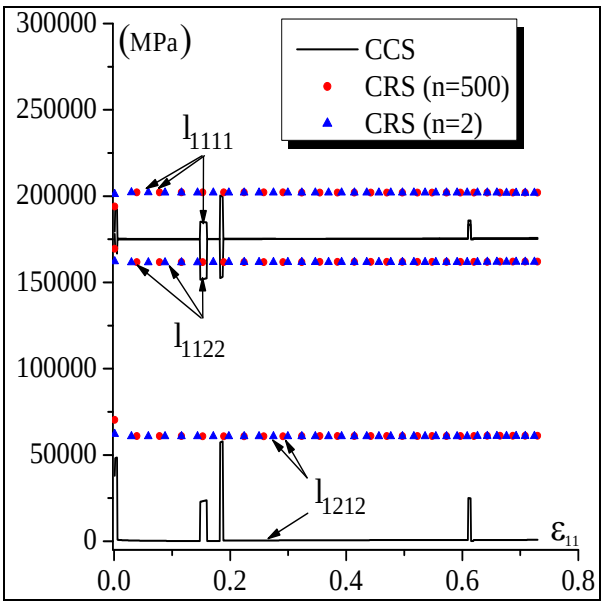
Fig. 1.16. Effet de la régularisation du critère de Schmid sur la morphologie des surfaces de charge prédites à 5% de déformation plastique équivalente : (a) monocristal # 1 ; (b) monocristal # 2 ; (c) monocristal # 3.

La Fig. 1.17 montre l'évolution de certaines composantes du module tangent analytique (supposées être représentatives des autres composantes), qui sont calculées en utilisant les deux différentes formes du critère de Schmid (à savoir le CCS et le CRS), en fonction de la déformation logarithmique ε_{11}.

Deux valeurs du paramètre n (2 et 50) sont utilisées pour prédire ces composantes du module tangent en utilisant le CRS. Le chargement imposé demeure le même que celui donné par la relation (1.152). En comparant les Figs. 1.17(a), 1.17(b) et 1.17(c), on peut remarquer que les composantes du module tangent déterminées par le CRS sont très peu sensibles à la valeur de n. Par ailleurs, ces composantes sont quasiment constantes tout au long de la déformation. Avec le CCS par contre, on note une variation importante des composantes du module tangent lors de la transition entre la phase élastique et la phase élastoplastique. En effet, les composantes ont naturellement des valeurs d'ordre élastique au début de la déformation. Puis, durant la transition élastoplastique la composante l_{1111} diminue alors que la composante l_{1212} augmente. C'est surtout au niveau de la composante de cisaillement l_{1212} que l'on note une très forte réduction. Par ailleurs, certains plateaux et pics apparaissent au même instant sur toutes les composantes du module tangent. Ces derniers sont tout simplement indicateurs du changement brutal de l'activité des systèmes, contrairement au cas du CRS où les variations des vitesses de glissement sont beaucoup plus douces (voir Figs. 1.12(a), 1.13(a) et 1.14(a)). À noter que l'intérêt tout particulier de l'analyse de l'évolution des composantes du module tangent analytique est motivé par les études des instabilités plastiques via l'approche de bifurcation. En effet, ce module tangent constitue un ingrédient principal dans l'application des critères de localisation qui seront détaillées dans le Chapitre 3 de ce manuscrit.



(a) (b)



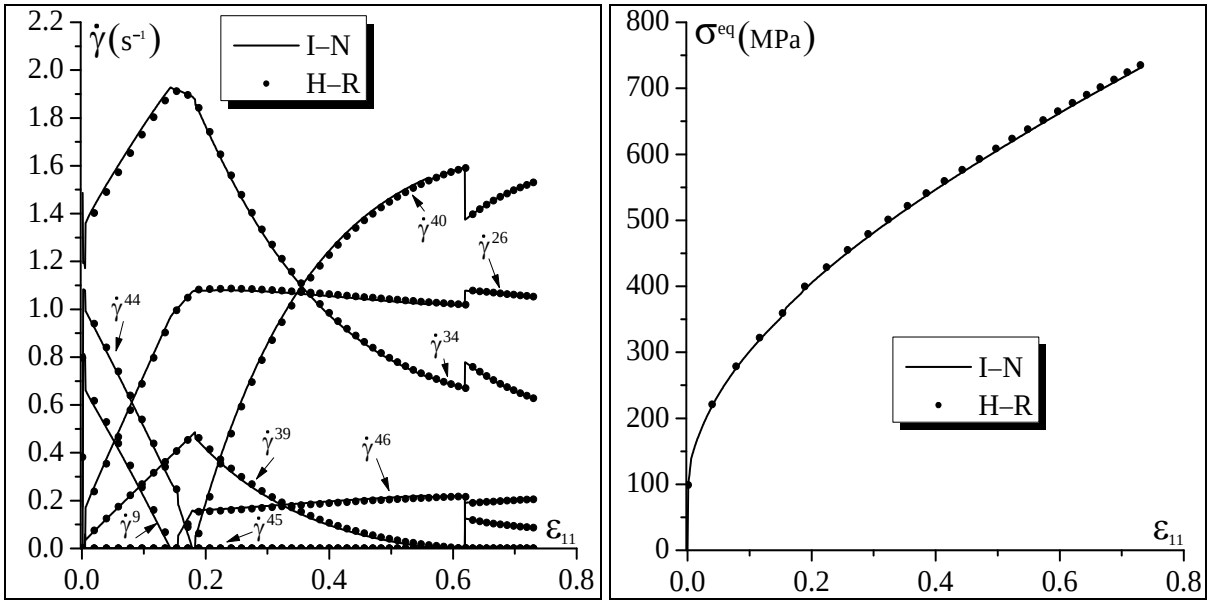
(c)

Fig. 1.17. Effet de la régularisation du critère de Schmid sur l'évolution des composantes représentatives du module tangent analytique : (a) monocristal # 1 ; (b) monocristal # 2 ; (c) monocristal # 3.

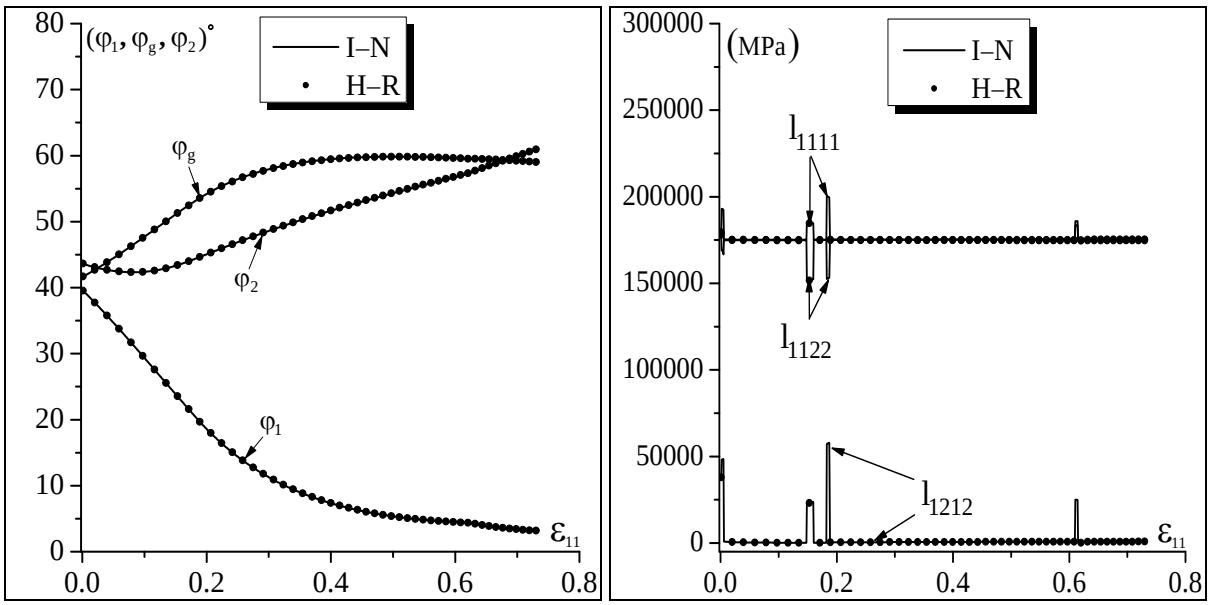
Dans la Section 1.4, une autre formulation des équations constitutives du monocristal introduite par Hill et Rice (1972) a été présentée. Celle-ci se distingue de la formulation moderne (Iwakuma et Nemat-Nasser, 1984) par le fait qu'elle prend en compte l'influence de la distorsion du réseau cristallographique sur les tenseurs d'orientations de Schmid, et par conséquent sur le comportement plastique. Afin d'évaluer l'influence de la distorsion du réseau cristallographique, nous comparons ces deux formulations à travers des résultats numériques. Pour être concis, nous limiterons notre étude au cas du monocristal # 3, que nous solliciterons avec le même chargement donné par la relation (1.152), tout en précisant que les résultats obtenus pour les deux autres orientations donnent exactement la même tendance.

La Fig. 1.18 montre les comparaisons des deux approches en termes d'évolution des vitesses de glissement (sur la Fig. 1.18(a)), de contrainte équivalente (sur la Fig. 1.18(b)), d'angles d'Euler (sur la Fig. 1.18(c)) et de composantes représentatives du module tangent (sur la Fig. 1.18(d)). Sur ces figures, les acronymes "I–N" et "H–R" font référence respectivement au modèle d'Iwakuma et Nemat-Nasser (1984) et à celui de Hill et Rice (1972). En analysant les comparaisons données sur la Fig. 1.18, nous pouvons conclure que les deux formulations précédemment citées permettent d'obtenir les mêmes résultats numériques. Cette observation confirme aussi l'hypothèse faite par Iwakuma et Nemat-Nasser (1984) dans le cas des métaux. Une illustration de cette hypothèse est donnée dans la Fig. 1.19 où le rapport du taux de déformation du réseau cristallographique (qui vaut $\mathbf{d}^e$ pour le modèle d'Iwakuma et Nemat-Nasser (1984), et $\mathbf{d}^*$ pour le modèle de Hill et Rice (1972)) caractérisant la distorsion du réseau cristallographique, sur son taux de rotation (qui vaut $\mathbf{w}^e$ pour le modèle

d'Iwakuma et Nemat-Nasser (1984), et $\mathbf{w}^*$ pour le modèle de Hill et Rice (1972)) est évalué pour chaque modèle. Dans les deux cas, on observe la même évolution, dans laquelle le rapport atteint très rapidement des valeurs très faibles qui sont de l'ordre de 10^{-2}. En effet, les matériaux polycristallins ont des modules de Young très élevés. Dans le cas présent, ce module de Young est de 210 GPa et correspond à celui de l'acier en construction. Par conséquent, le tenseur des modules élastiques $\mathbf{C}$ a des composantes très élevées (de l'ordre de 10^5) et si l'on considère la relation (1.10), où le taux de contrainte a des valeurs assez faibles en régime élastoplastique, on retrouve un taux de déformation élastique négligeable. Par ailleurs, en considérant la relation (1.133), on peut aisément déduire que les tenseurs $\boldsymbol{\mu}^\beta$ et $\mathbf{R}^\beta$ sont très proches car le tenseur des compliances élastiques $\mathbf{S}$ est très faible (de l'ordre de 10^{-5}). On aboutit donc à la même expression du taux de déformation plastique dans les deux formulations (voir respectivement les relations $(1.8)_{(1)}$ et (1.127)).



(a) (b)



(c) (d)

Fig. 1.18. Effet de la prise en compte de la distorsion du réseau cristallographique sur l'évolution de quelques variables mécaniques relatives au monocristal # 3 : (a) vitesses de glissement des systèmes actifs ; (b) contrainte équivalente de von Mises ; (c) angles d'Euler ; (d) quelques composantes représentatives du module tangent analytique.

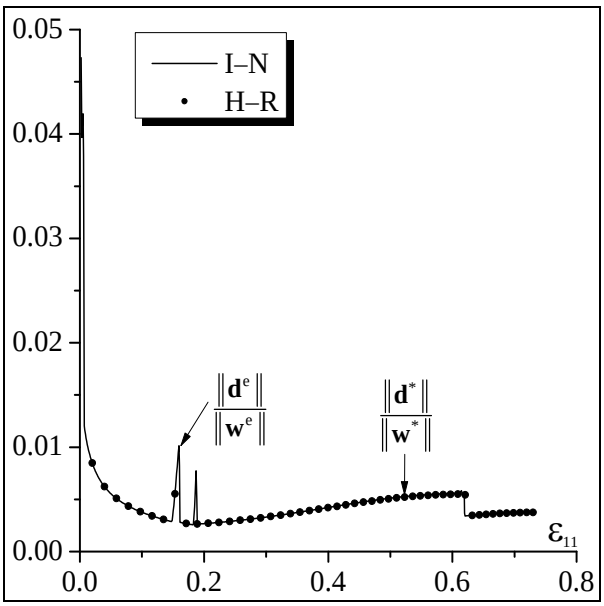


Fig. 1.19. Évolution du rapport de la norme euclidienne du taux de déformation du réseau cristallographique sur le taux de rotation en fonction de la déformation logarithmique suivant la direction longitudinale ; Comparaison entre le modèle d'Iwakuma et Nemat-Nasser (1984) et celui de Hill et Rice (1972).

1.6 Conclusions

Dans ce chapitre, le modèle de comportement élastoplastique du monocristal formulé dans le cadre des grandes déformations a été présenté dans une description eulérienne du mouvement. Un accent particulier a été mis sur l'utilisation du critère de Schmid et de sa forme régularisée pour décrire l'écoulement plastique. Deux types d'algorithmes ont été proposés pour intégrer les relations constitutives du monocristal, à savoir l'algorithme évolutif et l'algorithme de retour radial, et plusieurs simulations ont été effectuées pour évaluer la performance de ces algorithmes.

Conformément aux attentes, l'algorithme évolutif prédit les mêmes résultats que l'algorithme de retour radial. Cependant, l'algorithme évolutif est beaucoup plus performant que son homologue car il nécessite beaucoup moins d'itérations pour calculer les vitesses de glissement. Cet algorithme a donc été utilisé pour évaluer l'influence de la régularisation du critère de Schmid sur le comportement du monocristal. Pour des valeurs importantes du paramètre d'arrondissement de la surface de charge, il apparait que l'activité des systèmes prédite par la forme régularisée du critère de Schmid est la même que celle obtenue lorsqu'on utilise la forme standard, même si les vitesses de glissement correspondant aux deux critères sont très différentes. En revanche, dans le cadre particulier des simulations effectuées, la contrainte calculée est pratiquement la même pour des niveaux de déformation de l'ordre de 0,15. Cela explique par ailleurs le fait que les surfaces de charges initiales prédites suivant les deux critères soient quasi identiques. Pour de grandes déformations, on observe cependant un écart très net entre l'évolution des contraintes prédites suivant les deux critères. Une comparaison des deux critères en termes de détermination du module tangent analytique montre que les composantes de ce dernier sont très différentes selon le critère utilisé. Avec le critère classique de Schmid, on observe une très forte réduction des composantes de cisaillement lors du passage de la phase purement élastique à la phase élastoplastique. Par contre, avec la forme régularisée du critère de Schmid, les composantes du module tangent varient très peu lors du passage de la phase élastique à la phase élastoplastique.

Chapitre 2

Intégration numérique de la loi de comportement du polycristal en grandes déformations élastoplastiques

2.1 Introduction

Une prédiction satisfaisante du comportement mécanique des tôles métalliques repose non seulement sur une connaissance approfondie des différents mécanismes de déformation agissant à l'échelle microscopique, mais aussi sur une description pertinente des interactions entre cette échelle et l'échelle macroscopique. Le chapitre précédent a été consacré à la modélisation et l'intégration numérique de la loi de comportement du monocristal. Dans le présent chapitre, nous présentons l'approche utilisée pour déduire le comportement d'un agrégat polycristallin à partir du comportement des monocristaux constitutifs. Cette approche est basée sur le modèle autocohérent au sens de Hill (Hill, 1965a ; 1965b). Ce modèle est largement reconnu comme étant, entre autres, le schéma de transition d'échelles à champs moyens le plus précis qui est utilisé pour modéliser le comportement des matériaux polycristallins (Lebensohn et al., 2004 ; Castelnau et al., 2006 ; Brenner et al., 2009).

Les premières tentatives de prédiction du comportement mécanique des matériaux hétérogènes, à partir de celui de leurs constituants, remontent aux travaux de Voigt (1889) et Reuss (1929) qui sont basés sur les hypothèses d'homogénéité de déformation et de contrainte, respectivement. Ces deux modèles sont restreints, dans leurs versions initiales, au cas d'un comportement élastique linéaire du matériau étudié. Ainsi, le modèle de Voigt satisfait la relation de compatibilité de la déformation entre les grains mais ne permet pas de respecter la condition d'équilibre. Ce modèle constitue une borne

supérieure de l'estimation des interactions entre l'échelle locale et l'échelle macroscopique. Cela se traduit par une surestimation de la rigidité du matériau homogène équivalent. Par contre, le modèle de Reuss permet de respecter la condition d'équilibre à l'échelle locale mais engendre une incompatibilité de la déformation. Ce dernier modèle constitue une borne inférieure se traduisant par une sous-estimation de la rigidité du matériau homogène équivalent.

Le modèle de Voigt a été étendu par Taylor (1938) au cas d'un comportement rigide plastique qui, à son tour, a été étendu par Lin (1957, 1971) pour prendre en compte l'effet de l'élasticité dans la modélisation du comportement à l'échelle monocristalline. D'autre part, le modèle de Reuss a été étendu au cas du comportement plastique des grains par Sachs (1928) et Zaoui (1970). Le modèle de Sachs stipule que les contraintes microscopiques sont proportionnelles à la contrainte macroscopique, tandis que le modèle proposé par Zaoui (connu également sous l'appellation de modèle statique) suppose que les contraintes microscopiques sont identiques à la contrainte macroscopique. De par leurs différentes hypothèses simplificatrices, le modèle de Taylor–Lin et le modèle statique développé par Zaoui ne sont utilisés généralement que pour des études qualitatives. En effet, des écarts importants entre les résultats expérimentaux et les résultats numériques prédits par ces modèles sont souvent observés dans le cas des matériaux à forte hétérogénéité microstructurale.

L'approche autocohérente constitue une avancée significative dans la modélisation des interactions entre l'échelle locale et l'échelle macroscopique car elle permet d'éviter les limitations observées lors de l'utilisation des approches précédentes. En effet, cette approche permet de respecter à la fois la compatibilité de déformation et la relation d'équilibre à l'échelle locale. L'approche autocohérente est basée sur les travaux d'Eshelby (1957) qui a calculé la déformation inélastique d'une inclusion noyée dans une matrice infinie élastique et isotrope. Hershey (1954) et Kröner (1958) ont été les premiers à proposer un modèle autocohérent afin d'évaluer les propriétés macroscopiques des matériaux hétérogènes dans le cadre de l'élasticité linéaire. Par la suite, Budiansky et al. (1960), Budiansky et Wu (1962) ainsi que Kröner (1961) ont utilisé le schéma autocohérent pour établir une relation entre la déformation plastique des grains et leurs contraintes résiduelles. Dans l'approche de Kröner, tout comme celle de Budiansky et Wu, chaque grain est considéré comme étant une inclusion noyée dans une matrice formée par le reste des grains du polycristal. L'incompatibilité de la déformation plastique du grain est accommodée par une déformation élastique additionnelle de la matrice. Le modèle de Kröner permet d'obtenir de bonnes estimations dans le domaine élastique, mais conduit à des résultats plus mitigés dans le domaine élastoplastique car ce modèle ne prend en compte que la partie élastique des interactions entre l'échelle locale et l'échelle macroscopique. Hill est certainement l'auteur ayant apporté la contribution la plus importante dans le développement des schémas autocohérents dans le cadre d'un comportement élastoplastique (Hill, 1965a ; 1965b). En effet, Hill a proposé une formulation incrémentale de la loi de comportement et une accommodation élastoplastique de la matrice pour résoudre le problème d'incompatibilité de la déformation entre les grains. Hutchinson (1970) a comparé les modèles proposés par Taylor–Lin, Kröner et celui développé par Hill. Il a conclu

que le modèle de Hill permet d'obtenir la réponse macroscopique la moins rigide, illustrant ainsi une meilleure prise en compte des interactions (entre l'échelle locale et l'échelle macroscopique) par ce modèle. Plus tard, Berveiller et Zaoui (1979) jugeant le modèle de Hill trop implicite, ont proposé une forme simplifiée et isotrope de l'interaction élastoplastique (entre l'échelle locale et l'échelle macroscopique) en enrichissant le modèle de Kröner. Iwakuma et Nemat-Nasser (1984) ont généralisé pour la première fois l'approche autocohérente incrémentale de Hill au cas des grandes déformations élastoplastiques. Néanmoins, à l'échelle locale, leur approche s'est limitée au monocristal plan de type cubique à faces centrées défini par 4 systèmes de glissement. Les dernières améliorations notables de l'approche autocohérente incrémentale de Hill remontent aux travaux de Lipinski et al. (1989, 1995) qui ont établi, dans le cadre des grandes déformations élastoplastiques, une relation d'interaction entre l'échelle locale et l'échelle macroscopique basée sur une équation intégrale cinématique du gradient de vitesse. Cette équation intégrale cinématique est similaire à celle proposée par Dederichs et Zeller (1973) dans le cadre de l'élasticité linéaire.

Dans ce chapitre, nous présentons un schéma autocohérent adapté aux grandes déformations élastoplastiques. Ce schéma est fortement inspiré des travaux de Lipinski et al. (1989, 1995). La pertinence du schéma proposé réside dans l'intégration numérique des différentes équations définissant le comportement du polycristal. En effet, d'un point de vue numérique, le schéma autocohérent est un problème relativement complexe et fortement implicite dont l'inconnue principale est le module tangent macroscopique. Il est souvent résolu par la méthode itérative du point fixe. Cependant, cette méthode de résolution ne garantit pas toujours la convergence du calcul, surtout lorsque les non-linéarités matérielles sont importantes. Ce cas de figure est rencontré quand le stade des petites déformations est franchi. Pour améliorer la convergence de la résolution numérique des équations de l'approche autocohérente, nous proposons une nouvelle méthode de résolution basée sur la combinaison entre la méthode du point fixe et l'algorithme itératif de Newton–Raphson. À notre connaissance, une telle méthode n'a été utilisée pour résoudre les équations du schéma autocohérent que pour des matériaux élastoviscoplastiques (Galan et al., 2014).

Ce chapitre sera scindé en trois parties principales. Dans la première partie, les développements théoriques de l'approche autocohérente seront présentés. La seconde partie sera consacrée à la résolution numérique des différentes équations formulées à l'échelle du polycristal. À ce titre, l'algorithme développé sera présenté en détails. La dernière partie est dédiée à la présentation et à l'analyse des résultats numériques. Dans cette partie, la sensibilité de la réponse macroscopique du polycristal à plusieurs propriétés mécaniques (nature d'élasticité, écrouissage anisotrope, texture cristallographique et morphologique initiale, orientation du chargement, structure cristallographique) et choix de modélisation (forme de la surface de plasticité du monocristal) sera soigneusement étudiée. Par ailleurs, la performance de la méthode de Newton–Raphson comparée à celle du point fixe sera illustrée à travers plusieurs résultats numériques. Ce schéma autocohérent a également été implanté, sous forme d'une subroutine UMAT, dans le logiciel de calcul par éléments finis ABAQUS afin

d'effectuer des calculs de structure. Ainsi, l'intérêt de l'utilisation du module tangent cohérent à l'échelle monocristalline déterminé dans le chapitre précèdent (à la place du module tangent analytique) lors des simulations par éléments finis sera également mis en évidence.

2.2 Relations constitutives du polycristal

Dans le cadre d'une description eulérienne du mouvement, la loi de comportement du polycristal peut être exprimée de manière incrémentale sous une forme similaire à celle du monocristal (Eq. (1.44)) :

$$\dot{\mathbf{N}} = \mathbf{L} : \mathbf{G} \tag{2.1}$$

où $\mathbf{G}$ est le gradient de vitesse macroscopique, $\dot{\mathbf{N}}$ le taux de contrainte nominale macroscopique et $\mathbf{L}$ le module tangent macroscopique. Par ailleurs, $\mathbf{G}$ et $\dot{\mathbf{N}}$ sont déterminés en fonction de leurs homologues microscopiques $\mathbf{g}$ et $\dot{\mathbf{n}}$, respectivement, par les relations de moyenne suivantes (Lipinski, 1993) :

$$\mathbf{G} = \frac{1}{|\Omega|}\int_{\Omega} \mathbf{g}(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x} = \langle \mathbf{g}(\mathbf{x}) \rangle \quad ; \quad \dot{\mathbf{N}} = \frac{1}{|\Omega|}\int_{\Omega} \dot{\mathbf{n}}(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x} = \langle \dot{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \rangle \tag{2.2}$$

où Ω est le volume de l'agrégat polycristallin étudié (communément appelé VER ou milieu effectif) dans la configuration déformée et $\mathbf{x}$ un point matériel de Ω.

Réciproquement, le gradient de vitesse microscopique $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ et le taux de contrainte nominale microscopique $\dot{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$ peuvent être exprimés en fonction de leurs homologues macroscopiques $\mathbf{G}$ et $\dot{\mathbf{N}}$ par les relations de concentration suivantes :

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}(\mathbf{x}) : \mathbf{G} \quad ; \quad \dot{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) = \mathbf{B}(\mathbf{x}) : \dot{\mathbf{N}} \tag{2.3}$$

où $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ et $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ sont les tenseurs de concentration relatifs au gradient de vitesse et au taux de contrainte nominale, respectivement. L'existence de tels tenseurs a été démontrée par Mandel (1965) et Hill (1965a) dans le cadre de l'élasticité. En comparant les relations (2.2) et (2.3), on peut aisément déduire que les moyennes volumiques respectives des deux tenseurs de concentration sont égales au tenseur identité d'ordre 4 $\mathbf{I}_4$:

$$\langle \mathbf{A}(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{|\Omega|}\int_{\Omega} \mathbf{A}(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x} = \mathbf{I}_4 \quad ; \quad \langle \mathbf{B}(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{|\Omega|}\int_{\Omega} \mathbf{B}(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x} = \mathbf{I}_4 \tag{2.4}$$

Le module tangent $\mathbf{L}$ du milieu effectif peut être relié à son homologue microscopique $\mathbf{l}(\mathbf{x})$ en utilisant l'un des deux tenseurs de concentration introduits dans l'équation (2.3). Conformément à la plupart des travaux de la littérature, nous choisissons le tenseur de concentration lié au gradient de vitesse $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ pour exprimer $\mathbf{L}$ en fonction de son homologue microscopique. En introduisant l'expression de $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ donnée par l'équation $(2.3)_{(1)}$ dans celle de la loi de comportement

microscopique (Eq. (1.44)) et en calculant la moyenne volumique du taux de contrainte nominale, on obtient l'expression suivante du module tangent macroscopique $\mathbf{L}$:

$$\mathbf{L} = \frac{1}{|\Omega|}\int_{\Omega} \mathbf{l}(\mathbf{x}) : \mathbf{A}(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x} = \langle \mathbf{l}(\mathbf{x}) : \mathbf{A}(\mathbf{x}) \rangle \tag{2.5}$$

Il est important de noter que les schémas d'homogénéisation à champs moyens s'identifient au problème de détermination du tenseur de concentration $\mathbf{A}(\mathbf{x})$. Dans le cadre du schéma autocohérent en grandes déformations, il est difficile de donner l'expression explicite du tenseur de concentration $\mathbf{A}(\mathbf{x})$. Ce tenseur est plutôt déterminé de manière implicite par la résolution d'une équation intégrale cinématique (Lipinski et Berveiller, 1989) qui se présente sous la forme suivante :

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{G} + \int_{\Omega} \mathbf{\Gamma}(\mathbf{x}-\mathbf{x}') : \left(\mathbf{l}(\mathbf{x}') - \mathbf{L}^0\right) : \mathbf{g}(\mathbf{x}')\mathrm{d}\mathbf{x}' \tag{2.6}$$

où $\mathbf{L}^0$ désigne le module tangent d'un milieu homogène de référence et $\mathbf{\Gamma}$ le tenseur de Green modifié. La démonstration des fondements théoriques de cette équation intégrale cinématique fera l'objet de la Section 2.2.1.

2.2.1 Détermination de la relation de localisation

Dans cette section, les différentes étapes de la formulation de l'équation intégrale cinématique (2.6) sont présentées. Cette formulation repose sur trois équations principales :

- La relation d'équilibre quasi-statique à l'échelle du monocristal qui stipule que la divergence du taux de contrainte nominale est nulle :

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega \ ; \ \forall j = 1,2,3 : \quad \dot{n}_{ij,i}(\mathbf{x}) = 0 \quad ; \quad i = 1,2,3 \tag{2.7}$$

- La loi de comportement incrémentale du monocristal :

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega \ ; \ \forall i,j = 1,2,3 : \quad \dot{n}_{ij}(\mathbf{x}) = l_{ijkl}(\mathbf{x}) v_{k,l}(\mathbf{x}) \quad ; \quad k,l = 1,2,3 \tag{2.8}$$

- Les conditions aux limites de type cinématique :

$$\forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \ ; \ \forall i = 1,2,3 : \quad v_i(\mathbf{x}) = G_{ij} x_j \quad ; \quad j = 1,2,3 \tag{2.9}$$

où $\partial\Omega$ représente la frontière du VER Ω. Le vecteur $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ introduit dans les équations (2.8) et (2.9) représente la vitesse du point matériel $\mathbf{x}$ dans la configuration déformée. En insérant la relation (2.8) dans l'équation (2.7), on obtient la relation suivante :

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega \ ; \ \forall j = 1,2,3 : \quad \left(l_{ijkl}(\mathbf{x}) v_{k,l}(\mathbf{x})\right)_{,i} = 0 \quad ; \quad i,k,l = 1,2,3 \tag{2.10}$$

Le module tangent microscopique $\mathbf{l}$ peut être additivement décomposé en $\mathbf{L}^0$ et une fluctuation $\delta\mathbf{l}$:

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega : \quad \mathbf{l}(\mathbf{x}) = \mathbf{L}^0 + \delta\mathbf{l}(\mathbf{x}) \tag{2.11}$$

Cette décomposition additive permet de réécrire l'équation (2.10) sous la forme suivante :

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega \ ; \ \forall j = 1,2,3 : \quad L^0_{ijkl} v_{k,il}(\mathbf{x}) + \left(\delta l_{ijkl}(\mathbf{x}) v_{k,l}(\mathbf{x})\right)_{,i} = 0 \quad ; \quad i,k,l = 1,2,3 \tag{2.12}$$

En considérant l'équation de Navier reliant la déformation élastique linéaire isotrope d'un matériau aux forces de volume qui lui sont appliquées, le premier terme de l'équation (2.12) peut être assimilé à l'opérateur de Lamé que nous notons $\mathbf{\Lambda}$ et le second terme aux forces de volume $\mathbf{f}$:

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega \ ; \ \forall j = 1,2,3 : \quad \Lambda_{jk} v_k(\mathbf{x}) + \dot{f}_j(\mathbf{x}) = 0 \quad ; \quad k = 1,2,3 \tag{2.13}$$

avec

$$\forall j,k = 1,2,3 : \quad \begin{cases} \Lambda_{jk} = L^0_{ijkl} \partial_i \partial_l \\ \dot{f}_j(\mathbf{x}) = \left(\delta l_{ijkl}(\mathbf{x}) v_{k,l}(\mathbf{x})\right)_{,i} \end{cases} \quad ; \quad i,l = 1,2,3 \tag{2.14}$$

La forme faible (ou intégrale) de l'équation (2.12) peut être obtenue en introduisant le tenseur de Green défini par la relation suivante :

$$\forall \mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \Omega \ ; \ \forall j,m = 1,2,3 : \quad L^0_{iljk} \mathcal{G}_{lm,ik}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + \delta_{jm} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = 0 \quad ; \quad i,k,l = 1,2,3 \tag{2.15}$$

où δ_{jm} est le symbole de Kronecker et $\delta(\mathbf{x})$ la fonction de Dirac. Ce tenseur de Green peut être interprété comme étant l'action d'une force $\dot{f}_j(\mathbf{x}')$ concentrée au point $\mathbf{x}$ et valant :

$$\forall \ j = 1,2,3 : \quad \dot{f}_j(\mathbf{x}') = \delta_{jm} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \tag{2.16}$$

qui induit une vitesse $\mathbf{v}$ au point $\mathbf{x}'$ définie par la forme indicielle suivante :

$$\forall \ k = 1,2,3 : \quad v_k(\mathbf{x}') = \mathcal{G}_{km}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \tag{2.17}$$

et dont l'équation de Navier associée est :

$$\forall \mathbf{x}' \in \Omega \ ; \ \forall j = 1,2,3 : \quad \Lambda^+_{jl} v_l(\mathbf{x}') + \dot{f}_j(\mathbf{x}') = 0 \quad ; \quad l = 1,2,3 \tag{2.18}$$

L'opérateur $\mathbf{\Lambda}^+$ introduit dans la relation (2.18) est l'opérateur adjoint de $\mathbf{\Lambda}$. Il est défini par la relation suivante :

$$\forall \ j,l = 1,2,3 : \quad \Lambda^+_{jl} = \Lambda_{lj} \tag{2.19}$$

De l'équation (2.15), on peut déduire que le tenseur de Green a la propriété suivante :

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega \ ; \ \forall l,m = 1,2,3 : \quad \mathcal{G}_{lm}(\mathbf{x})_{\|\mathbf{x}\| \to \infty} \to 0 \tag{2.20}$$

Le tenseur de Green vérifie également les propriétés de différentiation explicitées ci-dessous :

$$\forall \ l,m,i,k = 1,2,3 : \quad \begin{cases} \left[\mathcal{G}_{lm}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\right]_{,i'} = \dfrac{\partial \mathcal{G}_{lm}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{\partial x'_i} = -\mathcal{G}_{lm,i}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \\ \left[\mathcal{G}_{lm,i}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\right]_{,k'} = \dfrac{\partial \mathcal{G}_{lm,i}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{\partial x'_k} = -\mathcal{G}_{lm,ik}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \end{cases} \tag{2.21}$$

Pour alléger l'écriture, nous omettrons de mentionner explicitement les indices muets à droite des équations dans la suite des développements, sachant que ces derniers prennent systématiquement des valeurs comprises entre 1 et 3.

En utilisant l'équation (2.15), la vitesse $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ du point matériel $\mathbf{x}$ peut être exprimée en fonction du tenseur de Green $\mathcal{G}$ par l'expression indicielle suivante :

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega \ ; \ \forall m = 1,2,3 : \quad v_m(\mathbf{x}) = \int_\Omega \delta_{mj}\, \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, v_j(\mathbf{x}')\, d\mathbf{x}' = -\int_\Omega L^0_{iljk}\, \mathcal{G}_{lm,\,ik}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, v_j(\mathbf{x}')\, d\mathbf{x}' \quad (2.22)$$

En utilisant les relations (2.21), on peut réécrire l'équation (2.22) sous la forme suivante :

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega \ ; \ \forall m = 1,2,3 : \quad v_m(\mathbf{x}) = -\int_\Omega L^0_{iljk} \left[\mathcal{G}_{lm}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\right]_{,\,i'k'} v_j(\mathbf{x}')\, d\mathbf{x}' \quad (2.23)$$

En appliquant le théorème d'Ostrogradski–Gauss, suivi d'une intégration par parties, on peut transformer l'équation (2.23) sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \forall m = 1,2,3 : \quad v_m(\mathbf{x}) = & -\int_{\partial\Omega} L^0_{iljk} \left[\mathcal{G}_{lm}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\right]_{,\,i'} v_j(\mathbf{x}')\, \nu_k(\mathbf{x}')\, d\mathbf{s}' \\ & + \int_{\partial\Omega} L^0_{iljk}\, \mathcal{G}_{lm}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, v_{j,\,k'}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, \nu_i(\mathbf{x}')\, d\mathbf{s}' - \int_\Omega L^0_{iljk}\, \mathcal{G}_{lm}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, v_{j,\,i'k'}(\mathbf{x}')\, d\mathbf{x}' \end{aligned} \quad (2.24)$$

où $\nu_m(\mathbf{x}')$ est la m^{ième} composante ($m = 1,2,3$) du vecteur normal à la surface élémentaire $d\mathbf{s}'$ au point $\mathbf{x}'$.

Par conséquent, en utilisant l'équation (2.12) et après quelques manipulations algébriques (en permutant d'abord les indices muets j et l, puis les indices muets l et k), on obtient les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \forall m = 1,2,3 : \quad L^0_{iljk}\, \mathcal{G}_{lm}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, v_{j,\,i'k'}(\mathbf{x}') &= L^0_{ijlk}\, \mathcal{G}_{jm}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, v_{l,\,i'k'}(\mathbf{x}') \\ &= L^0_{ijkl}\, \mathcal{G}_{jm}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, v_{k,\,i'l'}(\mathbf{x}') \\ &= -\mathcal{G}_{jm}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\left(\delta l_{ijkl}(\mathbf{x}')\, v_{k,\,l'}(\mathbf{x}')\right)_{,\,i'} \end{aligned} \quad (2.25)$$

Par ailleurs, en insérant l'expression développée dans l'équation (2.25) dans le troisième terme du second membre de l'équation (2.24) et en appliquant une intégration par parties à ce dernier, l'équation (2.24) devient :

$$\begin{aligned} \forall m = 1,2,3 : \quad v_m(\mathbf{x}) = & -\int_{\partial\Omega} L^0_{iljk} \left[\mathcal{G}_{lm}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\right]_{,\,i'} v_j(\mathbf{x}')\, \nu_k(\mathbf{x}')\, d\mathbf{s}' + \int_{\partial\Omega} L^0_{iljk}\, \mathcal{G}_{lm}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, v_{j,\,k'}(\mathbf{x}')\, \nu_i(\mathbf{x}')\, d\mathbf{s}' \\ & + \int_{\partial\Omega} \mathcal{G}_{jm}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, \delta l_{ijkl}(\mathbf{x}')\, v_{k,\,l'}(\mathbf{x}')\, \nu_i(\mathbf{x}')\, d\mathbf{s}' - \int_\Omega \left[\mathcal{G}_{jm}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\right]_{,\,i'} \delta l_{ijkl}(\mathbf{x}')\, v_{k,\,l'}(\mathbf{x}')\, d\mathbf{x}' \end{aligned}$$

(2.26)

En utilisant la propriété de différentiation du tenseur de Green explicitée dans la relation (2.21), l'équation (2.26) peut être réécrite sous la forme suivante :

$$\forall m=1,2,3: \quad v_m(\mathbf{x}) = \int_{\partial\Omega} L^0_{iljk}\, \mathcal{G}_{lm,i}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, v_j(\mathbf{x}')\, \nu_k(\mathbf{x}')\, d\mathbf{s}' + \int_{\partial\Omega} L^0_{iljk}\, \mathcal{G}_{lm}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, v_{j,k'}(\mathbf{x}')\, \nu_i(\mathbf{x}')\, d\mathbf{s}' + \int_{\partial\Omega} \mathcal{G}_{jm}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, \delta l_{ijkl}(\mathbf{x}')\, v_{k,l'}(\mathbf{x}')\, \nu_i(\mathbf{x}')\, d\mathbf{s}' + \int_{\Omega} \mathcal{G}_{jm,i}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, \delta l_{ijkl}(\mathbf{x}')\, v_{k,l'}(\mathbf{x}')\, d\mathbf{x}' \tag{2.27}$$

Les conditions aux limites cinématiques (voir la relation (2.9)) nous permettent d'exprimer le premier terme du second membre de l'équation (2.27) en fonction du gradient de vitesse macroscopique $\mathbf{G}$:

$$\begin{aligned}\int_{\partial\Omega} L^0_{iljk}\, \mathcal{G}_{lm,i}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, v_j(\mathbf{x}')\, \nu_k(\mathbf{x}')\, d\mathbf{s}' &= L^0_{iljk} G_{jp} \int_{\partial\Omega} \mathcal{G}_{lm,i}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, x'_p\, \nu_k(\mathbf{x}')\, d\mathbf{s}' \\ &= L^0_{iljk} G_{jp} \int_{\Omega} \left[\mathcal{G}_{lm,i}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, x'_p\right]_{,k'} d\mathbf{x}' \\ &= L^0_{iljk} G_{jp} \int_{\Omega} \left[\mathcal{G}_{lm,i}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\right]_{,k'} x'_p\, d\mathbf{x}' \\ &\quad + L^0_{iljk} G_{jk} \int_{\Omega} \mathcal{G}_{lm,i}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, d\mathbf{x}'\end{aligned} \tag{2.28}$$

De façon analogue, le second terme du second membre de l'équation (2.27) s'exprime sous la forme :

$$\begin{aligned}\int_{\partial\Omega} L^0_{iljk}\, \mathcal{G}_{lm}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, v_{j,k'}(\mathbf{x}')\, \nu_i(\mathbf{x}')\, d\mathbf{s}' &= L^0_{iljk} G_{jk} \int_{\partial\Omega} \mathcal{G}_{lm}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, \nu_i(\mathbf{x}')\, d\mathbf{s}' \\ &= L^0_{iljk} G_{jk} \int_{\Omega} \left[\mathcal{G}_{lm}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\right]_{,i'} d\mathbf{x}'\end{aligned} \tag{2.29}$$

Le troisième terme du second membre de l'équation (2.27) peut être simplifié de la même façon :

$$\int_{\partial\Omega} \mathcal{G}_{jm}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, \delta l_{ijkl}(\mathbf{x}')\, v_{k,l'}(\mathbf{x}')\, \nu_i(\mathbf{x}')\, d\mathbf{s}' = G_{kl} \int_{\partial\Omega} \mathcal{G}_{jm}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, \delta l_{ijkl}(\mathbf{x}')\, \nu_i(\mathbf{x}')\, d\mathbf{s}' \tag{2.30}$$

où $\mathbf{L}$ est le module tangent macroscopique introduit dans l'équation (2.5).

En utilisant les relations (2.20), (2.21), (2.28)–(2.30), on peut réécrire plus simplement l'équation (2.27) sous la forme suivante :

$$\forall m=1,2,3: \quad v_m(\mathbf{x}) = -L^0_{iljk} G_{jp} \int_{\Omega} \mathcal{G}_{lm,ik}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, x'_p\, d\mathbf{x}' + \int_{\Omega} \mathcal{G}_{jm,i}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, \delta l_{ijkl}(\mathbf{x}')\, v_{k,l'}(\mathbf{x}')\, d\mathbf{x}' \tag{2.31}$$

Par ailleurs, en utilisant la relation (2.15), le premier terme du second membre de l'équation (2.31) devient :

$$-L^0_{iljk} G_{jp} \int_{\Omega} \mathcal{G}_{lm,ik}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, x'_p\, d\mathbf{x}' = G_{jp} \int_{\partial\Omega} \delta_{jm}\, \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, x'_p\, d\mathbf{x}' = G_{mp} x_p \tag{2.32}$$

En insérant l'équation (2.32) dans la relation (2.31), on obtient l'expression suivante reliant le gradient de vitesse microscopique $\mathbf{g}$ au gradient macroscopique $\mathbf{G}$:

$$\forall m,n=1,2,3: \quad g_{mn}(\mathbf{x}) = v_{m,n}(\mathbf{x}) = G_{mn} + \int_{\Omega} \mathcal{G}_{jm,in}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\, \delta l_{ijkl}(\mathbf{x}')\, v_{k,l'}(\mathbf{x}')\, d\mathbf{x}' \tag{2.33}$$

En comparant l'équation (2.33) avec l'équation (2.6), on peut déduire que :

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega \;;\; \forall m,n,i,j=1,2,3: \quad \Gamma_{mnij}(\mathbf{x}) = \mathcal{G}_{jm,in}(\mathbf{x}) \tag{2.34}$$

Le calcul numérique du tenseur de Green modifiée $\mathbf{\Gamma}$ sera détaillé dans la Section 2.2.3.

L'équation (2.33) apparaît comme étant une décomposition additive du gradient de vitesse microscopique $\mathbf{g}$ en une partie homogène qui n'est rien d'autre que le gradient de vitesse macroscopique $\mathbf{G}$ et une fluctuation au même titre que la décomposition additive du module tangent microscopique (voir l'équation (2.11)).

2.2.2 Calcul du module tangent macroscopique

Pour calculer le module tangent macroscopique $\mathbf{L}$, dont l'expression est donnée par l'équation (2.5), il convient de déterminer le tenseur de concentration $\mathbf{A}(\mathbf{x})$. Ce dernier tenseur peut être obtenu à partir de la relation (2.6) sous les hypothèses suivantes :

- Les grains sont assimilés à des inclusions ellipsoïdales.
- Le module tangent microscopique $\mathbf{l}(\mathbf{x})$ ainsi que le gradient de vitesse microscopique $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ varient faiblement à l'intérieur du grain. On peut donc supposer que les différents champs microscopiques ($\mathbf{l}(\mathbf{x})$, $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ et par conséquent $\dot{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$) sont homogènes au sein du grain. Cette dernière hypothèse se traduit par :

$$\forall\, \mathrm{I}=1,...,\mathrm{N_g} \quad ; \quad \forall \mathbf{x}\in\Omega^{\mathrm{I}} : \quad \dot{\mathbf{n}}(\mathbf{x})=\dot{\mathbf{n}}^{\mathrm{I}} \quad ; \quad \mathbf{g}(\mathbf{x})=\mathbf{g}^{\mathrm{I}} \quad ; \quad \mathbf{l}(\mathbf{x})=\mathbf{l}^{\mathrm{I}} \tag{2.35}$$

où Ω^{I} représente le volume du grain I et $\mathrm{N_g}$ le nombre total de grains constituant le polycristal.

Par conséquent, $\dot{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$, $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ et $\mathbf{l}(\mathbf{x})$ peuvent s'exprimer sous la forme suivante :

$$\forall \mathbf{x}\in\Omega : \quad \dot{\mathbf{n}}(\mathbf{x})=\dot{\mathbf{n}}^{\mathrm{I}}\,\theta^{\mathrm{I}}(\mathbf{x}) \quad ; \quad \mathbf{g}(\mathbf{x})=\mathbf{g}^{\mathrm{I}}\,\theta^{\mathrm{I}}(\mathbf{x}) \quad ; \quad \mathbf{l}(\mathbf{x})=\mathbf{l}^{\mathrm{I}}\,\theta^{\mathrm{I}}(\mathbf{x}) \quad ; \quad \mathrm{I}=1,...,\mathrm{N_g} \tag{2.36}$$

où $\theta^{\mathrm{I}}(\mathbf{x})$ est une fonction définie par les relations suivantes :

$$\begin{cases} \theta^{\mathrm{I}}(\mathbf{x})=1 & \text{si} \quad \mathbf{x}\in\ \Omega^{\mathrm{I}} \\ \theta^{\mathrm{I}}(\mathbf{x})=0 & \text{si} \quad \mathbf{x}\notin\ \Omega^{\mathrm{I}} \end{cases} \tag{2.37}$$

En tenant compte de la deuxième hypothèse (liée à l'homogénéité des champs microscopiques), la loi de comportement des différents grains peut s'exprimer sous la forme suivante :

$$\forall\, \mathrm{I}=1,...,\mathrm{N_g} : \quad \dot{\mathbf{n}}^{\mathrm{I}}=\mathbf{l}^{\mathrm{I}}:\mathbf{g}^{\mathrm{I}} \tag{2.38}$$

Par ailleurs, grâce aux relations (2.35) et (2.37), l'équation (2.6) peut se décomposer comme suit :

$$\begin{aligned} \forall\, \mathrm{I}=1,...,\mathrm{N_g} : \quad \mathbf{g}^{\mathrm{I}} &= \frac{1}{\left|\Omega^{\mathrm{I}}\right|}\int_{\Omega^{\mathrm{I}}}\mathbf{g}(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x}=\mathbf{G}+\sum_{\mathrm{J}\neq\mathrm{I}}\mathbf{T}^{\mathrm{IJ}}:\left(\mathbf{l}^{\mathrm{I}}-\mathbf{L}^{0}\right):\mathbf{g}^{\mathrm{J}}+\mathbf{T}^{\mathrm{II}}:\left(\mathbf{l}^{\mathrm{I}}-\mathbf{L}^{0}\right):\mathbf{g}^{\mathrm{I}} \\ &= \mathbf{G}^{0}+\mathbf{T}^{\mathrm{II}}:\left(\mathbf{l}^{\mathrm{I}}-\mathbf{L}^{0}\right):\mathbf{g}^{\mathrm{I}} \end{aligned} \tag{2.39}$$

où $\mathbf{T}^{\mathrm{IJ}}$ est le tenseur d'ordre 4 représentant l'interaction entre les grains I et J. Ce tenseur est défini par la relation suivante :

$$\forall \mathrm{I},\mathrm{J}=1,...,\mathrm{N_g}: \quad \mathbf{T}^{\mathrm{IJ}}=\frac{1}{\left|\Omega^{\mathrm{I}}\right|}\int_{\Omega^{\mathrm{I}}}\int_{\Omega^{\mathrm{J}}}\mathbf{\Gamma}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\,\mathrm{d}\mathbf{x}\,\mathrm{d}\mathbf{x}' \tag{2.40}$$

Lorsque $\mathrm{I}=\mathrm{J}$, $\mathbf{T}^{\mathrm{II}}$ représente l'interaction entre le grain I et le milieu homogène de référence dont le module tangent vaut $\mathbf{L}^0$. Dans le cadre du schéma autocohérent, le milieu de référence est choisi comme étant le milieu effectif ($\mathbf{L}^0=\mathbf{L}$). Il en résulte que les interactions entre les grains sont négligeables par rapport aux interactions entre le grain et le milieu de référence (Lipinski et al., 1995). En d'autres termes, la somme $\sum_{\mathrm{J}\neq\mathrm{I}}\mathbf{T}^{\mathrm{IJ}}:(\mathbf{l}^{\mathrm{I}}-\mathbf{L}):\mathbf{g}^{\mathrm{J}}$ est négligeable devant le terme $\mathbf{T}^{\mathrm{II}}:(\mathbf{l}^{\mathrm{I}}-\mathbf{L}):\mathbf{g}^{\mathrm{I}}$, et $\mathbf{G}^0$ est donc très proche de $\mathbf{G}$. Ainsi, l'équation (2.39) devient :

$$\forall \mathrm{I}=1,...,\mathrm{N_g}: \quad \mathbf{g}^{\mathrm{I}}=\left(\mathbf{I}_4-\mathbf{T}^{\mathrm{II}}:\left(\mathbf{l}^{\mathrm{I}}-\mathbf{L}\right)\right)^{-1}:\mathbf{G}^0=\mathbf{a}^{\mathrm{II}}:\mathbf{G}^0 \tag{2.41}$$

où $\mathbf{I}_4$ désigne le tenseur identité d'ordre 4.

En utilisant l'équation (2.41), on peut exprimer la relation suivante entre $\mathbf{G}^0$ et $\mathbf{G}$:

$$\forall \mathrm{I}=1,...,\mathrm{N_g}: \quad \mathbf{g}^{\mathrm{I}}=\mathbf{a}^{\mathrm{II}}:\mathbf{G}^0 \Rightarrow \mathbf{G}=\left\langle\mathbf{a}^{\mathrm{II}}\right\rangle:\mathbf{G}^0 \Rightarrow \mathbf{g}^{\mathrm{I}}=\mathbf{a}^{\mathrm{II}}:\left\langle\mathbf{a}^{\mathrm{II}}\right\rangle^{-1}:\mathbf{G} \tag{2.42}$$

En comparant les équations $(2.3)_{(1)}$ et (2.42), on peut établir l'expression suivante du tenseur de concentration $\mathbf{A}^{\mathrm{I}}$ relatif au grain I :

$$\forall \mathrm{I}=1,...,\mathrm{N_g}: \quad \mathbf{A}^{\mathrm{I}}=\mathbf{a}^{\mathrm{II}}:\left\langle\mathbf{a}^{\mathrm{II}}\right\rangle^{-1}=\left(\mathbf{I}_4-\mathbf{T}^{\mathrm{II}}:\left(\mathbf{l}^{\mathrm{I}}-\mathbf{L}\right)\right)^{-1}:\left\langle\left(\mathbf{I}_4-\mathbf{T}^{\mathrm{II}}:\left(\mathbf{l}^{\mathrm{I}}-\mathbf{L}\right)\right)^{-1}\right\rangle^{-1} \tag{2.43}$$

Eimer (1967) a été le premier à exprimer la relation de concentration sous la forme de l'équation (2.41) et dans le cadre de l'élasticité linéaire. Une détermination complète du tenseur de concentration $\mathbf{A}^{\mathrm{I}}$ nécessite le calcul du tenseur d'interaction $\mathbf{T}^{\mathrm{II}}$. L'expression analytique de ce dernier n'a été déterminée que pour des milieux élastiques et isotropes (Berveiller et al., 1987). Cependant, pour les matériaux soumis à de grandes déformations élastoplastiques entraînant une évolution anisotrope du comportement mécanique, la détermination de l'expression analytique de ce tenseur est complexe. Dans ce cas, ce tenseur d'interaction est calculé par une méthode approchée basée sur une transformation de Fourier (Fassi-Fehri, 1985 ; Berveiller et al., 1987), à travers une intégrale sur un ellipsoïde schématisant le grain I. Le tenseur $\mathbf{T}^{\mathrm{II}}$ peut être exprimé de façon générique comme fonction du module tangent effectif $\mathbf{L}$, de la matrice $\mathbf{r}_{\mathrm{G}}^{\mathrm{I}}$ paramétrant l'orientation des directions principales de déformation par rapport au repère du laboratoire et des trois demi-axes a^{I}, b^{I}, et c^{I} de l'ellipsoïde :

$$\mathbf{T}^{\mathrm{II}}=\mathbf{Q}\left(\mathbf{L},\mathbf{r}_{\mathrm{G}}^{\mathrm{I}},\mathrm{a}^{\mathrm{I}},\mathrm{b}^{\mathrm{I}},\mathrm{c}^{\mathrm{I}}\right) \tag{2.44}$$

Le calcul du tenseur $\mathbf{T}^{\mathrm{II}}$ sera détaillé dans la Section 2.2.3.

Par ailleurs, sous l'hypothèse d'homogénéité des champs microscopiques, la relation (2.5) devient simplement :

$$\mathbf{L} = f^{\mathrm{I}}\,\mathbf{l}^{\mathrm{I}} : \mathbf{A}^{\mathrm{I}} \quad ; \quad \mathrm{I} = 1,...,\mathrm{N_g} \tag{2.45}$$

où f^{I} est la fraction volumique du grain I.

Le schéma de Taylor se déduit aisément du schéma autocohérent en supposant que le gradient de vitesse microscopique $\mathbf{g}^{\mathrm{I}}$ de chaque grain I constituant le polycristal est égal au gradient de vitesse macroscopique $\mathbf{G}$. Dans ce cas particulier, le tenseur de concentration se réduit au tenseur $\mathbf{I}_4$. En reprenant l'équation (2.45), le module tangent macroscopique $\mathbf{L}$ devient alors :

$$\mathbf{L} = f^{\mathrm{I}}\,\mathbf{l}^{\mathrm{I}} \quad ; \quad \mathrm{I} = 1,...,\mathrm{N_g} \tag{2.46}$$

Dans la Section 2.4, les prédictions numériques obtenues par le schéma de Taylor seront comparées à celles obtenues par le schéma autocohérent.

2.2.3 Calcul du tenseur d'interaction

Les détails du calcul du tenseur $\mathbf{T}^{\mathrm{II}}$ décrivant l'interaction entre le milieu effectif et le grain I sont présentés dans cette section. Nous rappelons que la forme de chaque grain est supposée ellipsoïdale. Ainsi, nous notons a_0^{I}, b_0^{I} et c_0^{I} (resp. a^{I}, b^{I} et c^{I}) les trois demi-axes du grain dans sa configuration initiale (resp. déformée) notée Ω_0^{I} (resp. Ω^{I}). Pour des raisons de commodité, $\mathbf{T}^{\mathrm{II}}$ est calculé dans le repère des directions principales de déformation du grain. En effet, les axes de ce repère coïncident avec les demi-axes du grain. Ce résultat se démontre en considérant le fait qu'il est toujours possible d'identifier une configuration antérieure à la configuration initiale, dans laquelle le grain est une sphère unité (i.e. de rayon 1). En désignant par $\Omega_{\mathrm{A}}^{\mathrm{I}}$ le volume du grain I dans cette configuration antérieure et par $\mathbf{x}_{\mathrm{A}}$ la position d'un point matériel appartenant à $\Omega_{\mathrm{A}}^{\mathrm{I}}$, on peut exprimer la relation suivante :

$$\mathbf{x}_{\mathrm{A}} . \mathbf{x}_{\mathrm{A}} \leq 1 \tag{2.47}$$

La position $\mathbf{x}$ dans la configuration déformée Ω^{I} du même point matériel est reliée à $\mathbf{x}_{\mathrm{A}}$ par la relation suivante :

$$\mathbf{x} = \mathbf{f}^{\mathrm{I}} . \mathbf{x}_{\mathrm{A}} \tag{2.48}$$

où $\mathbf{f}^{\mathrm{I}}$ est le gradient de transformation entre les configurations $\Omega_{\mathrm{A}}^{\mathrm{I}}$ et Ω^{I}. La Fig. 2.1 illustre cette transformation subie par le grain. Au début du calcul, $\mathbf{f}^{\mathrm{I}}$ représente le gradient de transformation entre les configurations $\Omega_{\mathrm{A}}^{\mathrm{I}}$ et Ω_0^{I} sera noté $\mathbf{f}_0^{\mathrm{I}}$. Ce dernier est fonction de a_0^{I}, b_0^{I}, et c_0^{I}. Plus de détails sur le calcul de $\mathbf{f}_0^{\mathrm{I}}$ seront donnés dans la Section 2.3.

En insérant l'équation (2.48) dans la relation (2.47), on obtient :

$$\mathbf{x}_A.\mathbf{x}_A = \left(\left(\mathbf{f}^I\right)^{-1}.\mathbf{x}\right).\left(\left(\mathbf{f}^I\right)^{-1}.\mathbf{x}\right) = \mathbf{x}.\left(\left(\mathbf{f}^I\right)^{-T}.\left(\mathbf{f}^I\right)^{-1}\right).\mathbf{x} \leq 1 \tag{2.49}$$

Une décomposition polaire du gradient de transformation $\mathbf{f}^I$ en une rotation $\mathbf{r}^I$ de corps rigide et une déformation pure $\mathbf{v}^I$ sous la forme :

$$\mathbf{f}^I = \mathbf{v}^I.\mathbf{r}^I \tag{2.50}$$

permet de transformer l'équation (2.49) en :

$$\mathbf{x}.\left(\left(\mathbf{v}^I\right)^{-1}\right)^2.\mathbf{x} \leq 1 \tag{2.51}$$

Dans le repère des directions principales de déformation du grain I, où les vecteurs de la base ne sont rien d'autres que les vecteurs propres de $\mathbf{v}^I$, la relation (2.51) apparaît comme étant l'équation d'un ellipsoïde dont les demi-axes ont les mêmes directions que les axes du repère. En effet, on peut déduire la relation suivante à partir de (2.51) :

$$\left(\frac{x_1}{v_1}\right)^2 + \left(\frac{x_2}{v_2}\right)^2 + \left(\frac{x_3}{v_3}\right)^2 \leq 1 \tag{2.52}$$

où v_1, v_2 et v_3 désignent les valeurs propres du tenseur de déformation pure $\mathbf{v}^I$ et x_1, x_2, x_3 les différentes composantes de $\mathbf{x}$. En analysant l'équation (2.52), on peut déduire que les demi-axes a^I, b^I et c^I du grain sont égaux aux valeurs propres de $\mathbf{v}^I$. Ces dernières sont calculées à partir des valeurs propres de $\mathbf{f}^I.\left(\mathbf{f}^I\right)^T$. En effet, en utilisant la relation (2.50), on obtient :

$$\mathbf{f}^I.\left(\mathbf{f}^I\right)^T = \left(\mathbf{v}^I\right)^2 \tag{2.53}$$

En notant $\mathbf{n}_1$, $\mathbf{n}_2$ et $\mathbf{n}_3$ les vecteurs propres de $\mathbf{f}^I.\left(\mathbf{f}^I\right)^T$ et λ_1, λ_2 et λ_3 les valeurs propres associées, l'orientation du repère des directions principales de déformation du grain I par rapport au repère du laboratoire est définie par la matrice de passage $\mathbf{r}_G^I$ dont les colonnes sont les vecteurs $\mathbf{n}_1$, $\mathbf{n}_2$ et $\mathbf{n}_3$. Les demi-axes a^I, b^I et c^I du grain sont, quant à eux, déterminés par les relations suivantes :

$$a^I = \sqrt{\lambda_1} \quad ; \quad b^I = \sqrt{\lambda_2} \quad ; \quad c^I = \sqrt{\lambda_3} \tag{2.54}$$

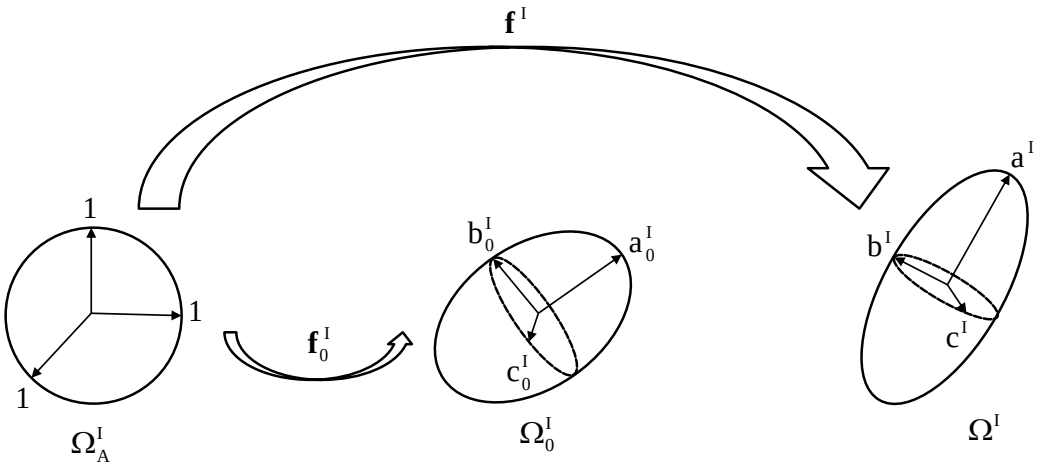


Fig. 2.1. Évolution de la morphologie du grain.

Afin de calculer le tenseur d'interaction $\mathbf{T}^{II}$ dans le repère des déformations principales du grain que nous noterons $(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_3)$, un transport du module tangent macroscopique $\mathbf{L}$ du repère du laboratoire au repère des déformations principales est requis. La relation de transport de ce tenseur s'exprime sous la forme indicielle suivante :

$$\forall\, m,n,p,q = 1,2,3 : \quad \bar{L}_{mnpq} = L_{ijkl}\, r^I_{G\,mi}\, r^I_{G\,nj}\, r^I_{G\,pk}\, r^I_{G\,ql} \quad ; \quad i,j,k,l = 1,2,3 \tag{2.55}$$

où $\bar{L}_{mnpq}\,(1 \le m,n,p,q \le 3)$ sont les composantes de $\mathbf{L}$ dans le repère $(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_3)$.

En combinant les relations (2.34) et (2.40), on obtient l'expression indicielle suivante :

$$\forall\, m,n,i,j = 1,2,3 : \quad \bar{T}^{II}_{mnij} = \frac{1}{|\Omega^I|}\int_{\Omega^I}\int_{\Omega^I} \Gamma_{mnij}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\,d\mathbf{x}\,d\mathbf{x}' = \frac{1}{|\Omega^I|}\int_{\Omega^I}\int_{\Omega^I} \mathcal{G}_{jm,in}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\,d\mathbf{x}\,d\mathbf{x}' \tag{2.56}$$

où $\bar{T}^{II}_{mnij}\,(1 \le m,n,i,j \le 3)$ sont les composantes de $\mathbf{T}^{II}$ dans le repère $(\mathbf{n}_1,\ \mathbf{n}_2,\ \mathbf{n}_3)$.

Par ailleurs, en utilisant la relation d'équivalence entre le tenseur de Green $\mathcal{G}$ et sa transformée de Fourier $\hat{\mathcal{G}}$ décrite ci-dessous :

$$\begin{aligned} \forall\, j,m = 1,2,3 : \quad & \hat{\mathcal{G}}_{jm}(\boldsymbol{\zeta}) = \frac{1}{|\Omega|}\int_{\Omega} \mathcal{G}_{jm}(\mathbf{x})\exp(i\,\boldsymbol{\zeta}.\mathbf{x})\,d\mathbf{x} \\ \Leftrightarrow \quad & \mathcal{G}_{jm}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\mathbb{R}^3} \hat{\mathcal{G}}_{jm}(\boldsymbol{\zeta})\exp(-i\,\boldsymbol{\zeta}.\mathbf{x})\,d\boldsymbol{\zeta} \end{aligned} \tag{2.57}$$

l'équation (2.56) peut se réécrire sous la forme suivante :

$$\forall\, m,n,i,j = 1,2,3 : \quad \bar{T}^{II}_{mnij} = -\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{1}{|\Omega^I|}\int_{\Omega^I}\int_{\Omega^I}\left(\int_{\mathbb{R}^3} \zeta_i\,\zeta_n\,\hat{\mathcal{G}}_{jm}(\boldsymbol{\zeta})\exp\left(-i\,\boldsymbol{\zeta}.(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\right)d\boldsymbol{\zeta}\right)d\mathbf{x}\,d\mathbf{x}' \tag{2.58}$$

En tenant compte de l'égalité entre le module tangent du milieu de référence $\mathbf{L}^0$ et le module tangent du milieu effectif $\mathbf{L}$ et en appliquant la transformée de Fourier à l'équation (2.15), on peut obtenir la relation suivante entre les tenseurs $\widehat{\mathcal{G}}$ et $\mathbf{L}$:

$$\begin{aligned} \forall \boldsymbol{\zeta} \in \mathbb{R}^3 : \quad \forall\, j,m = 1,2,3 : \quad & \overline{L}_{iljk}\left(-\zeta_i\, \zeta_k\, \widehat{\mathcal{G}}_{lm}\left(\boldsymbol{\zeta}\right)\right) + \delta_{jm} = 0 \\ & \Rightarrow \left(\overline{L}_{iljk}\, \zeta_i\, \zeta_k\right)\widehat{\mathcal{G}}_{lm}\left(\boldsymbol{\zeta}\right) = \delta_{jm} \quad ; \quad i,k,l = 1,2,3 \end{aligned} \tag{2.59}$$

En outre, l'espace vectoriel $\mathbb{R}^3$ peut être paramétré par une sphère de diamètre infini en utilisant les équations paramétriques suivantes :

$$\begin{cases} \zeta_1 = k\sin\theta\cos\varphi = k\,\chi_1 \\ \zeta_2 = k\sin\theta\sin\varphi = k\,\chi_2 \\ \zeta_3 = k\cos\theta = k\,\chi_3 \\ d\boldsymbol{\zeta} = k^2\sin\theta\, d\theta\, d\varphi\, dk \end{cases} \quad ; \quad \theta \in [0,\pi] \quad ; \quad \varphi \in [0,2\pi] \quad ; \quad k \in [0,+\infty[\tag{2.60}$$

En insérant les relations $(2.60)_{(1)}$, $(2.60)_{(2)}$ et $(2.60)_{(3)}$ dans l'équation (2.59), on obtient :

$$\forall\, j,m = 1,2,3 : \quad \left(\overline{L}_{iljk}\, \chi_i\, \chi_k\right) k^2\, \widehat{\mathcal{G}}_{lm}\left(\boldsymbol{\zeta}\right) = C_{jl}\left(k^2 \widehat{\mathcal{G}}_{lm}\left(\boldsymbol{\zeta}\right)\right) = \delta_{jm} \quad ; \quad i,k,l = 1,2,3 \tag{2.61}$$

En analysant l'équation (2.61), on peut remarquer que $\left(k^2\widehat{\mathcal{G}}\right)$ est l'inverse du tenseur $\mathbf{C}$ défini par :

$$\forall\, j,l = 1,2,3 : \quad C_{jl} = \overline{L}_{iljk}\, \chi_i\, \chi_k \quad ; \quad i,k = 1,2,3 \tag{2.62}$$

En utilisant les équations paramétriques (2.60) ainsi que l'expression de $(k^2\widehat{\mathcal{G}})$ calculée dans l'équation (2.61), l'équation (2.58) peut être exprimée sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} & \forall\, m,n,i,j = 1,2,3 : \\ & \overline{T}^{II}_{mnij} = -\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{1}{\left|\Omega^I\right|}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} k^2\, \widehat{\mathcal{G}}_{jm}\left(\boldsymbol{\zeta}\right)\chi_i\, \chi_n \sin\theta\, d\theta\, d\varphi \int_0^{+\infty} k^2 \left(\int_{\Omega^I}\int_{\Omega^I} \exp\left(-i\,\boldsymbol{\zeta}.\left(\mathbf{x}-\mathbf{x}'\right)\right) d\mathbf{x}\, d\mathbf{x}'\right) dk \\ & \quad = -\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{1}{\left|\Omega^I\right|}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} C^{-1}_{jm}\, \chi_i\, \chi_n \sin\theta\, d\theta\, d\varphi \int_0^{+\infty} k^2 \left(\int_{\Omega^I}\int_{\Omega^I} \exp\left(-i\,\boldsymbol{\zeta}.\left(\mathbf{x}-\mathbf{x}'\right)\right) d\mathbf{x}\, d\mathbf{x}'\right) dk \end{aligned} \tag{2.63}$$

La forme intégrale $f(\chi) = \int_0^{+\infty} k^2 \left(\int_{\Omega^I}\int_{\Omega^I} \exp\left(-i\,\boldsymbol{\zeta}.\left(\mathbf{x}-\mathbf{x}'\right)\right) d\mathbf{x}\, d\mathbf{x}'\right) dk$ utilisée dans l'équation (2.63) a été calculée par Berveiller et al. (1987) et elle vaut :

$$f\left(\chi\right) = \frac{\left(2\pi\right)^3\left(a^I b^I c^I\right)^2}{3\left[\left(a^I\chi_1\right)^2 + \left(b^I\chi_2\right)^2 + \left(c^I\chi_3\right)^2\right]^{3/2}} \tag{2.64}$$

En exprimant le volume du grain Ω^I en fonction de ses trois demi-axes, on obtient l'expression suivante des composantes du tenseur d'interaction :

$$\forall\, m,n,i,j=1,2,3 : \quad \overline{T}^{II}_{mnij} = -\frac{a^I b^I c^I}{4\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} C^{-1}_{jm}\,\frac{\chi_i\,\chi_n}{r^3}\sin\theta\,d\theta\,d\varphi \tag{2.65}$$

où r vaut $\sqrt{\left(a^I\chi_1\right)^2+\left(b^I\chi_2\right)^2+\left(c^I\chi_3\right)^2}$.

La forme intégrale (2.65) est difficile à déterminer exactement. Une approximation de cette dernière par une quadrature de Gauss–Legendre est utilisée. Les détails de cette approximation sont donnés dans l'Annexe B.

Une fois la valeur de $\mathbf{T}^{II}$ déterminée dans le repère des déformations principales du grain, une relation de transport inverse à celle utilisée dans (2.55) est appliquée à ce tenseur afin de l'exprimer dans le repère du laboratoire :

$$\forall\, m,n,p,q=1,2,3 : \quad T^{II}_{mnpq} = \overline{T}^{II}_{ijkl}\, r^I_{G\,im}\, r^I_{G\,jn}\, r^I_{G\,kp}\, r^I_{G\,lq} \quad ; \quad i,j,k,l=1,2,3 \tag{2.66}$$

2.3 Intégration numérique des relations constitutives du polycristal

Cette section est dédiée à l'intégration numérique des relations constitutives du modèle autocohérent, présentées dans la Section 2.2. Sur un pas de temps imposé $I^{\Delta}=[t_0,\, t_0+\Delta t]$, le schéma autocohérent est utilisé pour calculer le module tangent macroscopique $\mathbf{L}$ à partir des modules tangents microscopiques $\mathbf{l}^I$ de tous les grains I ($1\le I\le N_g$) constituant le VER Ω. Le calcul de $\mathbf{L}$ repose sur la résolution d'un système non-linéaire constitué de quatre équations principales que nous rappelons :

$$\forall\, I=1,\dots,N_g : \quad \begin{cases} \mathbf{T}^{II} = \mathbf{Q}\left(\mathbf{L},\mathbf{r}^I_G, a^I, b^I, c^I\right) \\ \mathbf{a}^{II} = \left(\mathbf{I}_4 - \mathbf{T}^{II} : \left(\mathbf{l}^I - \mathbf{L}\right)\right)^{-1} \\ \mathbf{A}^I = \mathbf{a}^{II} : \left(f^J \mathbf{a}^{JJ}\right)^{-1} \\ \mathbf{L} = f^J\, \mathbf{l}^J : \mathbf{A}^J \end{cases} \quad ; \quad J=1,\dots,N_g \tag{2.67}$$

En effet, les relations $(2.67)_{(1)}$, $(2.67)_{(2)}$, $(2.67)_{(3)}$ et $(2.67)_{(4)}$ sont aisément identifiables aux relations (2.44), (2.41), (2.43) et (2.45), respectivement. Le système (2.67) est résolu en utilisant deux boucles imbriquées : une boucle externe basée sur la méthode itérative du point fixe et une boucle interne basée sur l'algorithme itératif de Newton–Raphson. Ce dernier algorithme est utilisé pour déterminer le module tangent macroscopique $\mathbf{L}$ à partir des trois dernières équations de (2.67). L'algorithme de Newton–Raphson utilisé pour calculer $\mathbf{L}$ sera détaillé dans la section suivante.

2.3.1 Détermination du module tangent macroscopique par la méthode itérative de Newton–Raphson

La méthode de Newton–Raphson est utilisée pour résoudre le système d'équations non-linéaires ci-dessous :

$$\forall \mathrm{I}=1,...,\mathrm{N_g} : \begin{cases} \mathbf{a}^{\mathrm{II}} = \left(\mathbf{I}_4 - \mathbf{T}^{\mathrm{II}} : \left(\mathbf{l}^{\mathrm{I}} - \mathbf{L}\right)\right)^{-1} \\ \mathbf{A}^{\mathrm{I}} = \mathbf{a}^{\mathrm{II}} : \left(f^{\mathrm{J}} \mathbf{a}^{\mathrm{JJ}}\right)^{-1} \\ \mathbf{L} = f^{\mathrm{J}}\, \mathbf{l}^{\mathrm{J}} : \mathbf{A}^{\mathrm{J}} \end{cases} \quad ; \quad \mathrm{J}=1,...,\mathrm{N_g} \tag{2.68}$$

Pour résoudre ces équations, nous supposons que les modules tangents microscopiques $\mathbf{l}^{\mathrm{I}}$ et les tenseurs d'interactions $\mathbf{T}^{\mathrm{II}}$ relatifs aux différents grains constitutifs du polycristal sont constants et indépendants de $\mathbf{L}$ d'une itération à une autre de l'algorithme de Newton–Raphson. Ces tenseurs sont considérés comme étant des variables d'entrée de l'algorithme. Ainsi, les principales inconnues sont les 81 composantes de $\mathbf{L}$ qui sont déterminées à travers la résolution du système réduit suivant :

$$\mathbf{R} = \mathbf{L} - f^{\mathrm{I}}\, \mathbf{l}^{\mathrm{I}} : \mathbf{A}^{\mathrm{I}} = \mathbf{0} \quad ; \quad \mathrm{I}=1,...,\mathrm{N_g} \tag{2.69}$$

où $\mathbf{R}$ représente le résidu du système mathématique réduit. Pour calculer la matrice jacobienne relative à la méthode de Newton–Raphson, une différentiation de l'équation (2.69) par rapport à $\mathbf{L}$ est requise. Par commodité, le calcul s'effectuera dans un espace tensoriel isomorphe à l'espace des tenseurs d'ordre 4. Pour cela, nous désignons par $\boldsymbol{E}$ l'espace des tenseurs d'ordre 4 sur $\mathbb{R}^3$ (où les 4 indices des tenseurs définis sur cet espace tensoriel ont des valeurs comprises entre 1 et 3) et par $\boldsymbol{F}$ l'espace des tenseurs d'ordre 2 sur $\mathbb{R}^9$ (où les 2 indices des tenseurs définis sur cet espace tensoriel ont des valeurs comprises entre 1 et 9). Il est alors possible de définir une bijection $\mathcal{B}$ allant de $\boldsymbol{E}$ vers $\boldsymbol{F}$ tel que :

$$\forall \mathbf{a} \in \boldsymbol{E} \quad ; \quad \forall \mathrm{i,j}=1,...,9 : \quad \left(\mathcal{B}(\mathbf{a})\right)_{\mathrm{ij}} = \mathrm{a}_{\tau(\mathrm{i})\tau(\mathrm{j})} \tag{2.70}$$

où τ est une application définie de l'ensemble $\{1,2,...,9\}$ vers l'ensemble $\{1,2,3\}\times\{1,2,3\}$ par les relations suivantes :

$$\begin{array}{lll} \tau(1)=(1,1) & ; \quad \tau(2)=(1,2) & ; \quad \tau(3)=(1,3) \\ \tau(4)=(2,1) & ; \quad \tau(5)=(2,2) & ; \quad \tau(6)=(2,3) \\ \tau(7)=(3,1) & ; \quad \tau(8)=(3,2) & ; \quad \tau(9)=(3,3) \end{array} \tag{2.71}$$

Par ailleurs, la bijection $\mathcal{B}$ vérifie les propriétés suivantes :

$$\forall \mathbf{a},\mathbf{b} \in \boldsymbol{E} : \begin{cases} \mathcal{B}(\mathbf{a}+\mathbf{b}) = \mathcal{B}(\mathbf{a}) + \mathcal{B}(\mathbf{b}) \\ \mathcal{B}(\mathbf{a}:\mathbf{b}) = \mathcal{B}(\mathbf{a}).\mathcal{B}(\mathbf{b}) \end{cases} \tag{2.72}$$

On peut remarquer dans la relation $(2.72)_{(2)}$ que la bijection $\mathcal{B}$ permet de transformer un produit doublement contracté en un produit simplement contracté. Cette propriété particulière sera très largement utilisée pour le calcul de la matrice jacobienne du système réduit (2.69). Des détails sur la démonstration des propriétés de $\mathcal{B}$ sont donnés dans l'Annexe B.

Afin de calculer la matrice jacobienne du système (2.69) dans l'espace tensoriel $\boldsymbol{F}$, nous exprimons $\mathcal{B}(\mathbf{dR})$ en fonction de $\mathcal{B}(\mathbf{dL})$. En partant de l'équation (2.69), on obtient par différentiation directe :

$$\mathbf{dR} = \mathbf{dL} - f^{\mathrm{I}}\,\mathbf{l}^{\mathrm{I}} : \mathbf{dA}^{\mathrm{I}} \quad ; \quad \mathrm{I} = 1,...,\mathrm{N_g} \tag{2.73}$$

L'équation (2.73) peut être réécrite de manière équivalente dans l'espace $\boldsymbol{F}$ sous la forme suivante :

$$\mathcal{B}(\mathbf{dR}) = \mathcal{B}(\mathbf{dL}) - f^{\mathrm{I}}\,\mathcal{B}(\mathbf{l}^{\mathrm{I}}).\mathcal{B}(\mathbf{dA}^{\mathrm{I}}) \quad ; \quad \mathrm{I} = 1,...,\mathrm{N_g} \tag{2.74}$$

Nous introduisons à présent deux opérateurs tensoriels d'ordre 4 sur $\mathbb{R}^9$, notés $\mathcal{C}_1$ et $\mathcal{C}_2$, respectivement, et vérifiant les relations suivantes :

$$\forall \mathbf{x},\mathbf{y} \in \boldsymbol{F} \;:\; \begin{cases} \mathbf{x}.\mathbf{y} = \mathcal{C}_1(\mathbf{x}) : \mathbf{y} \\ \mathbf{y}.\mathbf{x} = \mathcal{C}_2(\mathbf{x}) : \mathbf{y} \end{cases} \tag{2.75}$$

Des détails sur les expressions analytiques de ces opérateurs sont donnés dans l'Annexe B.

En utilisant la relation $(2.75)_{(1)}$, l'équation (2.74) peut se réécrire sous la forme suivante :

$$\mathcal{B}(\mathbf{dR}) = \mathcal{B}(\mathbf{dL}) - f^{\mathrm{I}}\,\mathcal{C}_1\left(\mathcal{B}(\mathbf{l}^{\mathrm{I}})\right) : \mathcal{B}(\mathbf{dA}^{\mathrm{I}}) \quad ; \quad \mathrm{I} = 1,...,\mathrm{N_g} \tag{2.76}$$

Pour calculer la matrice jacobienne du système, il convient d'exprimer à présent $\mathcal{B}(\mathbf{dA}^{\mathrm{I}})$ en fonction de $\mathcal{B}(\mathbf{dL})$. Ainsi, une différentiation de l'équation $(2.68)_{(2)}$ permet d'obtenir la relation suivante :

$$\begin{aligned} \forall \mathrm{I} = 1,...,\mathrm{N_g} : \quad \mathbf{dA}^{\mathrm{I}} &= \mathbf{da}^{\mathrm{II}} : \left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{a}^{\mathrm{JJ}}\right)^{-1} + \mathbf{a}^{\mathrm{II}} : \mathbf{d}\left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{a}^{\mathrm{JJ}}\right)^{-1} \\ &= \mathbf{da}^{\mathrm{II}} : \left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{a}^{\mathrm{JJ}}\right)^{-1} - \mathbf{a}^{\mathrm{II}} : \left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{a}^{\mathrm{JJ}}\right)^{-1} : \left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{da}^{\mathrm{JJ}}\right) : \left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{a}^{\mathrm{JJ}}\right)^{-1} \\ &= \mathbf{da}^{\mathrm{II}} : \left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{a}^{\mathrm{JJ}}\right)^{-1} - \mathbf{A}^{\mathrm{I}} : \left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{da}^{\mathrm{JJ}}\right) : \left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{a}^{\mathrm{JJ}}\right)^{-1} \quad ; \quad \mathrm{J} = 1,...,\mathrm{N_g} \end{aligned} \tag{2.77}$$

En effet, en notant $\mathbf{K}$ l'expression $\left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{a}^{\mathrm{JJ}}\right)^{-1}$ et en utilisant la relation $\mathbf{K} : \mathbf{K}^{-1} = \mathbf{I}_4$, on obtient par différentiation :

$$\begin{aligned} \mathbf{dK} &= -\mathbf{K} : \mathbf{d}\left(\mathbf{K}^{-1}\right) : \mathbf{K} \\ &= -\left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{a}^{\mathrm{JJ}}\right)^{-1} : \left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{da}^{\mathrm{JJ}}\right) : \left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{a}^{\mathrm{JJ}}\right)^{-1} \quad ; \quad \mathrm{J} = 1,...,\mathrm{N_g} \end{aligned} \tag{2.78}$$

Dans l'espace tensoriel $\boldsymbol{F}$, l'équation (2.77) peut être réécrite comme suit :

$$\mathcal{B}(\mathbf{dA}^{\mathrm{I}}) = \mathcal{B}(\mathbf{da}^{\mathrm{II}}).\mathcal{B}\left(\left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{a}^{\mathrm{JJ}}\right)^{-1}\right) - \mathcal{B}(\mathbf{A}^{\mathrm{I}}).\mathcal{B}\left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{da}^{\mathrm{JJ}}\right).\mathcal{B}\left(\left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{a}^{\mathrm{JJ}}\right)^{-1}\right) \quad ; \quad \mathrm{J} = 1,...,\mathrm{N_g} \tag{2.79}$$

Par la suite, en utilisant la relation $(2.75)_{(2)}$, on peut transformer l'équation (2.79) sous la forme suivante :

$$\mathcal{B}(\mathbf{dA}^{\mathrm{I}}) = \mathcal{C}_2\left[\mathcal{B}\left(\left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{a}^{\mathrm{JJ}}\right)^{-1}\right)\right] : \mathcal{B}(\mathbf{da}^{\mathrm{II}}) - \mathcal{B}(\mathbf{A}^{\mathrm{I}}).\mathcal{B}\left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{da}^{\mathrm{JJ}}\right).\mathcal{B}\left(\left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{a}^{\mathrm{JJ}}\right)^{-1}\right) \quad ; \quad \mathrm{J} = 1,...,\mathrm{N_g} \tag{2.80}$$

Afin de scinder l'équation (2.80) en produit doublement contracté de deux parties distinctes comprenant d'une part les termes différentiels d'ordre 0 et d'autre part les termes différentiels d'ordre

1, un troisième opérateur tensoriel d'ordre 4 sur $\mathbb{R}^9$ est introduit. Cet opérateur, noté $\mathcal{D}$, est défini par la relation :

$$\forall \mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z} \in \boldsymbol{F} : \quad \mathbf{x}\,.\,\mathbf{y}\,.\,\mathbf{z} = \mathcal{D}(\mathbf{x},\mathbf{z}) : \mathbf{y} \tag{2.81}$$

L'expression analytique de l'opérateur tensoriel $\mathcal{D}$ est donnée en détails dans l'Annexe B.

En utilisant l'opérateur tensoriel $\mathcal{D}$, l'équation (2.80) peut être réécrite sous la forme suivante :

$$\mathcal{B}\left(\mathbf{dA}^{\mathrm{I}}\right) = \mathcal{C}_2\left[\mathcal{B}\left(\left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{a}^{\mathrm{JJ}}\right)^{-1}\right)\right] : \mathcal{B}\left(\mathbf{da}^{\mathrm{II}}\right) - \mathcal{D}\left[\mathcal{B}\left(\mathbf{A}^{\mathrm{I}}\right), \mathcal{B}\left(\left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{a}^{\mathrm{JJ}}\right)^{-1}\right)\right] : \left(f^{\mathrm{J}}\mathcal{B}\left(\mathbf{da}^{\mathrm{JJ}}\right)\right) \quad ; \quad \mathrm{J} = 1,\ldots,\mathrm{N_g} \tag{2.82}$$

La dernière étape du calcul de la matrice jacobienne du système (2.69) consiste à exprimer $\mathbf{da}^{\mathrm{II}}$ en fonction de $\mathbf{dL}$. En effet, en utilisant la relation $(2.68)_{(1)}$, on peut déduire que :

$$\forall \mathrm{I} = 1,\ldots,\mathrm{N_g} : \quad \mathbf{d}\left(\left(\mathbf{a}^{\mathrm{II}}\right)^{-1}\right) = \mathbf{T}^{\mathrm{II}} : \mathbf{dL} \tag{2.83}$$

Similairement à la relation (2.78), l'équation (2.83) peut être réécrite sous la forme :

$$\forall \mathrm{I} = 1,\ldots,\mathrm{N_g} : \quad \mathbf{da}^{\mathrm{II}} = -\mathbf{a}^{\mathrm{II}} : \mathbf{d}\left(\left(\mathbf{a}^{\mathrm{II}}\right)^{-1}\right) : \mathbf{a}^{\mathrm{II}} = -\mathbf{a}^{\mathrm{II}} : \mathbf{T}^{\mathrm{II}} : \mathbf{dL} : \mathbf{a}^{\mathrm{II}} \tag{2.84}$$

Dans l'espace tensoriel $\boldsymbol{F}$, l'équation (2.84) prend la forme suivante :

$$\forall \mathrm{I} = 1,\ldots,\mathrm{N_g} : \quad \mathcal{B}\left(\mathbf{da}^{\mathrm{II}}\right) = -\mathcal{D}\left[\mathcal{B}\left(\mathbf{a}^{\mathrm{II}} : \mathbf{T}^{\mathrm{II}}\right), \mathcal{B}\left(\mathbf{a}^{\mathrm{II}}\right)\right] : \mathcal{B}\left(\mathbf{dL}\right) \tag{2.85}$$

En insérant l'équation (2.85) dans la relation (2.82), on peut exprimer $\mathbf{dA}^{\mathrm{I}}$ en fonction de $\mathbf{dL}$:

$$\forall \mathrm{I} = 1,\ldots,\mathrm{N_g} : \quad \mathcal{B}\left(\mathbf{dA}^{\mathrm{I}}\right) = \mathcal{X}^{\mathrm{I}} : \mathcal{B}\left(\mathbf{dL}\right) \tag{2.86}$$

où $\mathcal{X}^{\mathrm{I}}$ est un tenseur d'ordre 4 sur $\mathbb{R}^9$ défini par la relation suivante :

$$\begin{aligned} \forall \mathrm{I} = 1,\ldots,\mathrm{N_g} : \quad \mathcal{X}^{\mathrm{I}} = & -\mathcal{C}_2\left[\mathcal{B}\left(\left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{a}^{\mathrm{JJ}}\right)^{-1}\right)\right] : \mathcal{D}\left[\mathcal{B}\left(\mathbf{a}^{\mathrm{II}} : \mathbf{T}^{\mathrm{II}}\right), \mathcal{B}(\mathbf{a}^{\mathrm{II}})\right] \\ & + \mathcal{D}\left[\mathcal{B}\left(\mathbf{A}^{\mathrm{I}}\right), \mathcal{B}\left(\left(f^{\mathrm{J}}\mathbf{a}^{\mathrm{JJ}}\right)^{-1}\right)\right] : \left[f^{\mathrm{J}}\mathcal{D}\left[\mathcal{B}\left(\mathbf{a}^{\mathrm{JJ}} : \mathbf{T}^{\mathrm{JJ}}\right), \mathcal{B}(\mathbf{a}^{\mathrm{JJ}})\right]\right] \quad ; \quad \mathrm{J} = 1,\ldots,\mathrm{N_g} \end{aligned} \tag{2.87}$$

En combinant les relations (2.76) et (2.86), on obtient l'expression finale reliant $\mathcal{B}(\mathbf{dR})$ à $\mathcal{B}(\mathbf{dL})$:

$$\mathcal{B}(\mathbf{dR}) = \left[\mathcal{C}_1\left(\mathcal{B}(\mathbf{I}_4)\right) - f^{\mathrm{I}}\,\mathcal{C}_1\left(\mathcal{B}\left(\mathbf{l}^{\mathrm{I}}\right)\right) : \mathcal{X}^{\mathrm{I}}\right] : \mathcal{B}(\mathbf{dL}) \quad ; \quad \mathrm{I} = 1,\ldots,\mathrm{N_g} \tag{2.88}$$

De l'équation (2.88), on déduit finalement l'expression de la matrice jacobienne $\mathbf{J}$ du système réduit (2.69) :

$$\mathbf{J}(\mathbf{L}) = \mathcal{C}_1\left(\mathcal{B}(\mathbf{I}_4)\right) - f^{\mathrm{I}}\,\mathcal{C}_1\left(\mathcal{B}\left(\mathbf{l}^{\mathrm{I}}\right)\right) : \mathcal{X}^{\mathrm{I}} \quad ; \quad \mathrm{I} = 1,\ldots,\mathrm{N_g} \tag{2.89}$$

Il faut préciser que $\mathbf{J}$ est un tenseur d'ordre 4 sur $\mathbb{R}^9$.

Le calcul itératif de $\mathbf{L}$ s'effectue dans l'espace tensoriel $\boldsymbol{F}$ suivant les deux étapes ci-après :

- Étape 1 : À l'itération courante s ($\mathrm{s} \geq 1$), on vérifie si la condition suivante est satisfaite :

$$\frac{\left\| \mathbf{L}^{(s)} - f^{I}\, \mathbf{l}^{I} : \mathbf{A}^{I\,(s)} \right\|_{L_2}}{\left\| \mathbf{L}^{(s)} \right\|_{L_2}} \leq 10^{-3} \quad ; \quad I = 1,\ldots,N_g \tag{2.90}$$

où $\mathbf{L}^{(s)}$ est la valeur du module tangent macroscopique à l'itération s et $\mathbf{A}^{I\,(s)}$ la s^{ème} itération du tenseur de concentration $\mathbf{A}^{I}$ calculée en utilisant les relations ci-dessous :

$$\begin{cases} \mathbf{a}^{II\,(s)} = \left(\mathbf{I}_4 - \mathbf{T}^{II} : \left(\mathbf{l}^{I} - \mathbf{L}^{(s)} \right) \right)^{-1} \\ \mathbf{A}^{I\,(s)} = \mathbf{a}^{II\,(s)} : \left(f^{J} \mathbf{a}^{JJ\,(s)} \right)^{-1} \end{cases} \quad ; \quad J = 1,\ldots,N_g \tag{2.91}$$

Si la condition (2.90) est satisfaite, alors la convergence de l'algorithme itératif de résolution du système (2.69) est atteinte. Dans ce cas, on arrête le calcul itératif et on actualise les différentes variables de sortie du schéma itératif :

$$\begin{aligned} &\mathbf{L} = \mathbf{L}^{(s)} \\ &\forall I = 1,\ldots,N_g : \quad \mathbf{A}^{I} = \mathbf{A}^{I\,(s)} \end{aligned} \tag{2.92}$$

Si la condition (2.90) n'est pas satisfaite, alors au moins une nouvelle itération est nécessaire pour calculer le module tangent macroscopique. Dans ce cas, l'Étape 2 est alors exécutée.

- Étape 2 : On calcule la matrice jacobienne du système (2.69) dans l'espace tensoriel $\boldsymbol{F}$:

$$\mathbf{J}\left(\mathbf{L}^{(s)}\right) = \mathcal{C}_1\left(\mathcal{B}(\mathbf{I}_4)\right) - f^{I}\, \mathcal{C}_1\left(\mathcal{B}\left(\mathbf{l}^{I}\right)\right) : \mathcal{X}^{I\,(s)} \quad ; \quad I = 1,\ldots,N_g \tag{2.93}$$

où $\mathcal{X}^{I\,(s)}$ est définie par la forme itérative suivante :

$$\begin{aligned} \mathcal{X}^{I\,(s)} = &-\mathcal{C}_2\left[\mathcal{B}\left(\left(f^{J}\mathbf{a}^{JJ\,(s)}\right)^{-1}\right)\right] : \mathcal{D}\left[\mathcal{B}\left(\mathbf{a}^{II\,(s)} : \mathbf{T}^{II}\right), \mathcal{B}\left(\mathbf{a}^{II\,(s)}\right)\right] \\ &+ \mathcal{D}\left[\mathcal{B}(\mathbf{A}^{I\,(s)}), \mathcal{B}\left((f^{J}\mathbf{a}^{JJ\,(s)})^{-1}\right)\right] : \left[f^{J}\mathcal{D}\left[\mathcal{B}(\mathbf{a}^{JJ\,(s)} : \mathbf{T}^{JJ}), \mathcal{B}(\mathbf{a}^{JJ\,(s)})\right]\right] \quad ; \quad J = 1,\ldots,N_g \end{aligned} \tag{2.94}$$

Par la suite, on calcule la nouvelle valeur du module tangent macroscopique dans l'espace tensoriel $\boldsymbol{F}$:

$$\mathcal{B}\left(\mathbf{L}^{(s+1)}\right) = \mathcal{B}\left(\mathbf{L}^{(s)}\right) - \mathbf{J}^{-1}\left(\mathbf{L}^{(s)}\right) : \mathcal{B}\left(\mathbf{R}^{(s)}\right) \tag{2.95}$$

Une fois le tenseur $\mathcal{B}\left(\mathbf{L}^{(s+1)}\right)$ calculé, on lui applique l'inverse de la bijection $\mathcal{B}$ pour obtenir la valeur de $\mathbf{L}^{(s+1)}$. Des détails sur le calcul de l'inverse de $\mathcal{B}$ sont donnés dans l'Annexe B. Enfin, on incrémente la variable d'itération $s \leftarrow s+1$ et on reprend le calcul itératif à partir de l'Étape 1.

Il faut rappeler que la procédure itérative de Newton–Raphson, décrite dans les Étapes 1 et 2, n'est qu'un module du schéma autocohérent qui, dans un cadre plus général, repose sur une combinaison de la méthode itérative du point fixe et de celle de Newton–Raphson. Ainsi, à la première itération du schéma de Newton–Raphson, on affecte au module tangent macroscopique $\mathbf{L}$ sa dernière valeur

calculée dans la méthode du point fixe. Le schéma autocohérent sera présenté de façon plus globale dans la Section 2.3.2.

2.3.2 Algorithme d'intégration du polycristal

Le schéma autocohérent est utilisé pour calculer le module tangent macroscopique $\mathbf{L}$ sur le pas de temps imposé $I^{\Delta} = [t_i, t_f]$ (avec $t_f = t_i + \Delta t$). L'algorithme relatif au schéma autocohérent utilisé dans le cadre de ce travail repose sur une combinaison de la méthode du point fixe et de l'algorithme de Newton–Raphson. Pour exprimer les différentes variables au début et à la fin du pas de temps I^{Δ}, les instants t_i et t_f seront placés en indice de ces variables. Par contre, les grandeurs mécaniques gardant une valeur constante sur tout le pas de temps ne seront pas indicées. C'est le cas par exemple des gradients de vitesse microscopiques $\mathbf{g}^I$ et des tenseurs de concentration $\mathbf{A}^I$ de tous les grains, du gradient de vitesse macroscopique $\mathbf{G}$ ou du module tangent macroscopique $\mathbf{L}$. L'algorithme d'intégration du polycristal se décompose en quatre étapes principales définies comme suit :

- Étape 0 : Cette étape correspond à l'initialisation de toutes les variables caractérisant l'état mécanique du matériau à l'instant $t = 0$ (au début du calcul). Pour chacun des grains constituant le polycristal, il s'agit notamment des variables liées à l'écrouissage (tel que les cissions critiques et les densités de dislocations moyennes), des trois angles d'Euler représentant l'orientation cristallographique, de la fraction volumique, de la contrainte résiduelle et des demi-axes du grain (en assimilant la forme du grain à un ellipsoïde). D'autres variables sont des variables intermédiaires utilisées uniquement pour les besoins du calcul et qui nécessitent une initialisation. C'est le cas de la matrice de passage du repère des directions principales de déformation du grain au repère du laboratoire, du gradient de transformation, du tenseur de concentration du grain et du module tangent macroscopique.

  En supposant que le repère des directions principales de déformation de chaque grain I coïncide au début du calcul avec le repère du laboratoire, la matrice de passage $\mathbf{r}_G^I$ doit être initialisée au tenseur $\mathbf{I}_2$.

  Dans l'optique d'initialiser le gradient de transformation $\mathbf{f}_0^I$ au début du calcul, nous introduisons la notion de ratio des demi-axes du grain correspondant. En supposant que tous les grains ont initialement les mêmes demi-axes notés respectivement a, b et c, ce ratio se caractérise par le triplet (α, β, γ) qui est défini par les relations suivantes :

$$\alpha = \frac{a}{\min(a,b,c)} \quad ; \quad \beta = \frac{b}{\min(a,b,c)} \quad ; \quad \gamma = \frac{c}{\min(a,b,c)} \tag{2.96}$$

  En réalité, le ratio des demi-axes est la variable caractéristique utilisée pour décrire la forme de chaque grain plutôt que les demi-axes. À partir de ce ratio, les demi-axes sont normalisés

de telle sorte que le volume de l'ellipsoïde soit égal au volume de la sphère unité. Ainsi, pour chaque grain I, les nouveaux demi-axes a_0^I, b_0^I et c_0^I doivent vérifier les relations :

$$a_0^I = \frac{a}{r} \quad ; \quad b_0^I = \frac{b}{r} \quad ; \quad c_0^I = \frac{c}{r} \tag{2.97}$$

où r vaut $\sqrt[3]{a\,b\,c}$.

Nous introduisons également la notion d'orientation morphologique initiale du grain. Cette orientation est caractérisée par les trois angles d'Euler $\varphi_1, \varphi_g, \varphi_2$ caractérisant le tenseur de rotation $\mathbf{r}_G^I$ du repère des déformations principales du grain I par rapport au repère du laboratoire (la relation entre les trois angles d'Euler et le tenseur de rotation $\mathbf{r}_G^I$ est similaire à celle donnée dans l'équation (1.1) du Chapitre 1).

Le gradient de transformation $\mathbf{f}_0^I$ peut alors être exprimé comme suit :

$$\forall I = 1,...,N_g : \quad \mathbf{f}_0^I = \mathbf{r}_G^I . \begin{pmatrix} a_0^I & 0 & 0 \\ 0 & b_0^I & 0 \\ 0 & 0 & c_0^I \end{pmatrix} . (\mathbf{r}_G^I)^T \tag{2.98}$$

En effet, on peut aisément déduire, en appliquant la procédure décrite par les équations (2.47) –(2.54) de la Section 2.2, que le tenseur $\mathbf{f}_0^I$ représente la transformation isochore ($\det\left(\mathbf{f}_0^I\right) = 1$) de la sphère unité en un ellipsoïde de demi-axes a_0^I, b_0^I et c_0^I dont le ratio vaut (α, β, γ). Par ailleurs, le tenseur de concentration $\mathbf{A}^I$ du grain I est initialisé au début du calcul au tenseur $\mathbf{I}_4$.

Enfin, la valeur affectée au module tangent macroscopique au début du calcul est la moyenne volumique des modules élastiques des différents grains :

$$\mathbf{L} = f^I \, \mathbf{C}^I \quad ; \quad I = 1,...,N_g \tag{2.99}$$

où $\mathbf{C}^I$ est le tenseur d'élasticité relatif au grain I. Plus de détails sur le calcul de ce tenseur sont donnés dans l'équation (1.11) du Chapitre 1.

- Étape 1 : Avant la première itération ($k = 0$) du schéma autocohérent sur le pas de temps courant I^Δ, les valeurs des différentes variables microscopiques (relatives aux grains) qui ont été calculées à la convergence du schéma autocohérent sur le pas de temps précédent sont chargées. Il s'agit en particulier (pour chaque grain I) du gradient de transformation $\mathbf{f}_{t_i}^I$, du tenseur d'orientation $\mathbf{r}_{t_i}^I$ du réseau cristallographique par rapport au repère lié à la configuration déformée du grain, des variables liées aux systèmes de glissement des grains tel que les cissions critiques ($(\tau_c^{\alpha\,I})_{t_i}$; $\alpha = 1,...,N_s$), les glissements cumulés ($(\gamma^{\alpha\,I})_{t_i}$;

$\alpha = 1,...,N_s$), et les densités de dislocations moyennes ($(\rho^{\alpha\,I})_{t_i}$; $\alpha = 1,...,N_s$), de la contrainte de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}^{I}_{t_i}$ et enfin du tenseur de concentration $\mathbf{A}^{I}$. Le module tangent macroscopique $\mathbf{L}$ est également initialisé à sa valeur calculée à la convergence du pas de temps précédent. Il faut préciser qu'au premier incrément de calcul, les valeurs des différentes variables chargées sont celles déterminées à l'Étape 0. Une fois les valeurs initiales des différentes variables chargées, on passe à l'Étape 2 où le calcul itératif du schéma autocohérent débute.

- Étape 2 : À l'itération courante k ($k \geq 1$), les valeurs des différentes variables microscopiques sont calculées à l'instant final t_f. Ainsi, pour chaque grain I du polycristal, le gradient de vitesse microscopique $\mathbf{g}^{I(k)}$ est calculé en utilisant la relation $\mathbf{g}^{I(k)} = \mathbf{A}^{I(k)} : \mathbf{G}$ (voir les équations (2.42) et (2.43)). On intègre ensuite les relations constitutives du monocristal en utilisant l'algorithme évolutif et en considérant $\mathbf{g}^{I(k)}$ comme gradient de vitesse (voir la Section 1.3.1 pour l'utilisation du critère classique de Schmid et la Section 1.3.2. pour l'utilisation de la forme régularisée du critère de Schmid). On obtient ainsi le gradient de transformation $\mathbf{f}^{I(k)}_{t_f}$, le tenseur d'orientation cristallographique $\mathbf{r}^{I(k)}_{t_f}$, les cissions critiques ($(\tau_c^{\alpha\,I(k)})_{t_f}$; $\alpha = 1,...,N_s$), les glissements cumulés ($(\gamma^{\alpha\,I(k)})_{t_f}$; $\alpha = 1,...,N_s$), les densités de dislocations moyennes ($(\rho^{\alpha\,I(k)})_{t_f}$; $\alpha = 1,...,N_s$), la contrainte de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}^{I(k)}_{t_f}$ et le module tangent microscopique $\mathbf{l}^{I(k)}_{t_f}$. On calcule ensuite pour chaque grain I le tenseur d'interaction $\mathbf{T}^{II(k)}$ qui peut être exprimé sous la forme générique suivante (comme mentionné dans l'équation (2.44)) :

$$\mathbf{T}^{II(k)} = \mathbf{Q}\left(\mathbf{L}^{(k)}, \mathbf{r}^{I(k)}_{G\,t_f}, a^{I(k)}_{t_f}, b^{I(k)}_{t_f}, c^{I(k)}_{t_f}\right) \tag{2.100}$$

où $\mathbf{r}^{I(k)}_{G\,t_f}$, $a^{I(k)}_{t_f}$, $b^{I(k)}_{t_f}$ et $c^{I(k)}_{t_f}$ sont déduits du gradient de transformation $\mathbf{f}^{I(k)}_{t_f}$. Les détails du calcul du tenseur d'interaction sont donnés dans la Section 2.2.3. Après le calcul des différentes variables microscopiques, on calcule la contrainte macroscopique de Cauchy $\boldsymbol{\Sigma}^{(k)}_{t_f}$. Celle-ci est égale à la moyenne des contraintes microscopiques de Cauchy :

$$\boldsymbol{\Sigma}^{(k)}_{t_f} = f^{I}\,\boldsymbol{\sigma}^{I(k)}_{t_f} \quad ; \quad I = 1,...,N_g \tag{2.101}$$

On passe ensuite à l'Étape 3.

- Étape 3 : À cette étape, on calcule la nouvelle valeur du module tangent macroscopique $\mathbf{L}^{(k+1)}$ ainsi que les tenseurs de concentration des différents grains $\mathbf{A}^{I(k+1)}$ en utilisant l'algorithme de Newton–Raphson décrit dans la Section 2.3.1. Pour ce calcul, les variables d'entrée sont les modules tangents microscopiques $\mathbf{l}^{I(k)}_{t_f}$ et les tenseurs d'interactions $\mathbf{T}^{II(k)}$ des grains.

  On teste ensuite la convergence du schéma autocohérent en vérifiant la condition suivante :

$$\sum_{I=1}^{N_g} f^I \frac{\left\| \mathbf{A}^{I(k+1)} - \mathbf{A}^{I(k)} \right\|_{L_2}}{\left\| \mathbf{A}^{I(k)} \right\|_{L_2}} \leq 10^{-3} \tag{2.102}$$

S'il s'avère que la condition (2.102) est satisfaite, alors la convergence du schéma autocohérent est atteinte sur le pas de temps imposé I^{Δ}. On actualise dans ce cas le module tangent macroscopique et les tenseurs de concentration :

$$\begin{aligned} &\mathbf{L} = \mathbf{L}^{(k+1)} \\ &\forall I = 1,...,N_g : \quad \mathbf{A}^I = \mathbf{A}^{I(k+1)} \end{aligned} \tag{2.103}$$

Par ailleurs, on enregistre les dernières valeurs des différentes variables microscopiques calculées à l'instant t_f afin qu'elles soient utilisées au prochain incrément de calcul en tant que valeurs initiales (pour l'intégration des relations constitutives du monocristal).

En revanche, si la condition (2.102) n'est pas satisfaite, alors on incrémente la variable d'itération $k \leftarrow k+1$ et on reprend le calcul itératif à partir de l'Étape 2.

Il faut préciser que l'utilisation du schéma itératif de Newton–Raphson pour calculer le module tangent $\mathbf{L}^{(k+1)}$ dans l'Étape 3 constitue une amélioration majeure de l'algorithme de résolution des équations du schéma autocohérent. Dans la plupart des ouvrages consacrés au schéma autocohérent, seule la méthode du point fixe est utilisée. Le module tangent $\mathbf{L}^{(k+1)}$ vérifie dans ce cas :

$$\mathbf{L}^{(k+1)} = f^I \, \mathbf{l}_{t_f}^{I(k)} : \mathbf{A}^{I(k)} \quad ; \quad I = 1,...,N_g \tag{2.104}$$

où $\mathbf{A}^{I(k)}$ vaut :

$$\begin{cases} \mathbf{a}^{II(k)} = \left(\mathbf{I}_4 - \mathbf{T}^{II(k)} : \left(\mathbf{l}_{t_f}^{I(k)} - \mathbf{L}^{(k)} \right) \right)^{-1} \\ \mathbf{A}^{I(k)} = \mathbf{a}^{II(k)} : \left(f^J \mathbf{a}^{JJ(k)} \right)^{-1} \end{cases} \quad ; \quad J = 1,...,N_g \tag{2.105}$$

On calcule ensuite $\mathbf{A}^{I(k+1)}$ en utilisant les relations suivantes :

$$\begin{cases} \mathbf{a}^{II(k+1)} = \left(\mathbf{I}_4 - \mathbf{T}^{II(k)} : \left(\mathbf{l}_{t_f}^{I(k)} - \mathbf{L}^{(k+1)} \right) \right)^{-1} \\ \mathbf{A}^{I(k+1)} = \mathbf{a}^{II(k+1)} : (f^J \mathbf{a}^{JJ(k+1)})^{-1} \end{cases} \quad ; \quad J = 1,...,N_g \tag{2.106}$$

Puis, on vérifie la convergence du schéma autocohérent en utilisant la relation suivante :

$$\mathrm{Max}\left(\sum_{I=1}^{N_g} f^I \frac{\left\| \mathbf{A}^{I(k+1)} - \mathbf{A}^{I(k)} \right\|_{L_2}}{\left\| \mathbf{A}^{I(k)} \right\|_{L_2}}, \frac{\left\| \mathbf{L}^{(k+1)} - \mathbf{L}^{(k)} \right\|_{L_2}}{\left\| \mathbf{L}^{(k)} \right\|_{L_2}} \right) \leq 10^{-3} \tag{2.107}$$

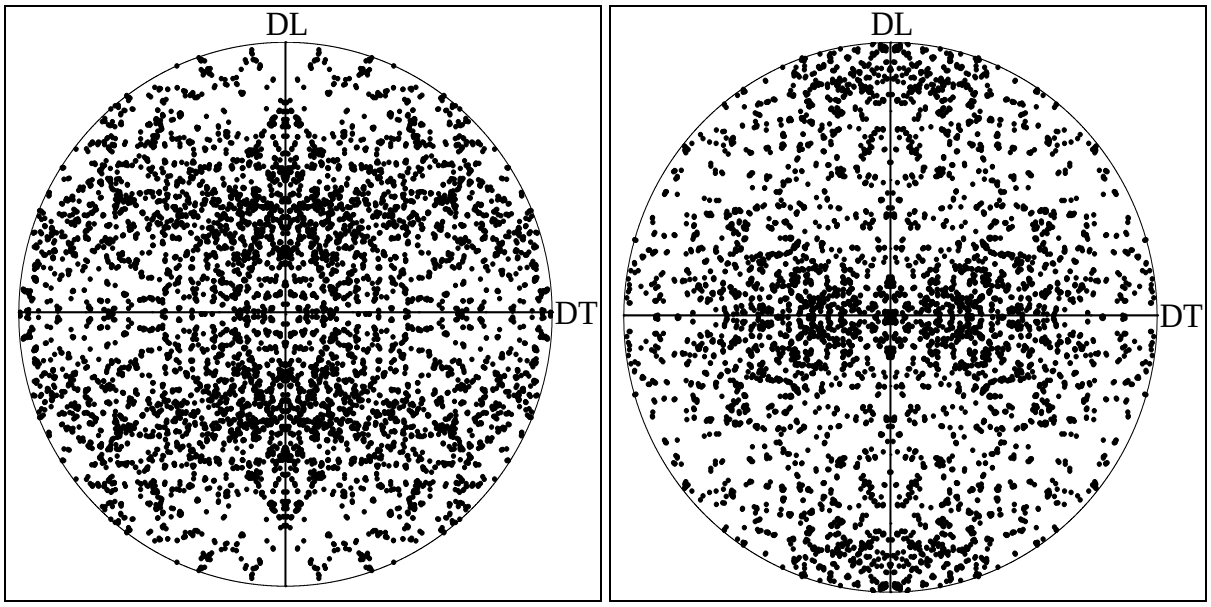
La pertinence de l'utilisation de la méthode itérative de Newton–Raphson (par rapport à celle du point fixe) sera illustrée dans la Section 2.4.8.

2.4 Résultats numériques

Dans cette section, différentes prédictions numériques obtenues en utilisant les modèles autocohérent et de Taylor–Lin sont présentées. Une étude de sensibilité est menée pour évaluer l'effet de plusieurs paramètres microstructuraux (écrouissage, texture cristallographique et morphologique, élasticité…) ainsi que plusieurs choix de modélisation (schéma de transition d'échelles, forme de la surface de charge…) sur la réponse macroscopique d'un agrégat polycristallin et sur le comportement des différents grains constituant cet agrégat.

2.4.1 Paramètres microstructuraux

Chaque polycristal étudié est défini par les paramètres microstructuraux suivants : les constantes d'élasticité, les paramètres d'écrouissage (matrice d'interaction, cissions critiques initiales, exposent de la loi d'écrouissage, module d'écrouissage initial…), les fractions volumiques et les orientations cristallographiques des différents grains constituant le polycristal. Les orientations cristallographiques forment la texture cristallographique initiale. Reubrez (1992) a estimé, en se basant sur une analyse statistique, que 1000 orientations cristallographiques est un nombre suffisant pour obtenir un agrégat polycristallin qui soit statistiquement représentatif de la structure métallique étudiée. Dans le cas présent, un polycristal constitué de 2000 grains est utilisé dans les différentes simulations. Les orientations cristallographiques initiales des différents grains sont générées de manière à obtenir une texture initialement orthotrope (Yoshida et Kuroda, 2012). Les figures de pôles définissant cette texture initiale, suivant les plans {111} et {110}, sont données dans les Fig. 2.2.(a) et Fig. 2.2.(b), respectivement. La fraction volumique initiale est supposée la même pour tous les grains. La morphologie initiale des grains est approximée par une sphère dont le repère des directions principales de déformation est initialement confondu avec le repère du laboratoire. Par ailleurs, sauf mention contraire, la structure cristallographique de tous les grains constituant le polycristal est de type CC et la loi d'écrouissage utilisée est la loi puissance dont la forme est donnée dans la Section 1.2.3.



(a) (b)

Fig. 2.2. Texture cristallographique initiale du polycristal : (a) figure de pôles {111} ; (b) figure de pôles {110}.

Sauf mention contraire, les paramètres d'élasticité et d'écrouissage utilisés dans les différentes simulations sont ceux donnés dans le Tab. 2.1. L'élasticité est supposée orthotrope (voir la Section 1.2.1 pour plus de détails sur le calcul de la matrice d'élasticité dans ce cas) et le module d'Young E_0 du matériau (isotrope) de référence considéré est fixé à 210 GPa. Nous précisons également que la cission critique initiale τ_0 est la même pour tous les systèmes de glissement.

Élasticité			**Écrouissage**		
C_{11}	C_{12}	C_{44}	h_0	τ_0	n
1,353 E_0	1,091 E_0	0,576 E_0	390 MPa	40 MPa	0,35

Tab. 2.1. Paramètres d'élasticité et d'écrouissage.

Les 9 paramètres définissant la matrice d'interaction d'écrouissage $\mathbf{a}$ (voir Annexe A) sont fixés à 1. Ce choix traduit la non-prise en compte de l'effet de l'écrouissage anisotrope sur l'évolution des cissions critiques. Par conséquent, l'écrouissage utilisé est supposé isotrope.

Les modèles autocohérent et de Taylor–Lin sont implantés, sous forme d'une subroutine UMAT, dans le logiciel de calcul par éléments finis ABAQUS. Cette implantation a été utilisée pour simuler les essais de traction uniaxiale et de cisaillement simple. Pour imposer les conditions aux limites relatives à ces essais, un seul élément fini de type C3D8R a été utilisé dans ces simulations. L'agrégat polycristallin étudié est attaché à l'unique point de Gauss de cet élément. Un repère orthonormé est attaché au polycristal. Les directions 1, 2 et 3 de ce repère coïncident avec la direction de laminage, la direction transverse et la direction normale au plan de la tôle, respectivement.

2.4.2 Validation qualitative du modèle autocohérent

Dans cette section, le modèle autocohérent est validé qualitativement en se basant sur des prédictions aux échelles macroscopique et microscopique.

Dans un premier temps, l'essai de traction uniaxiale (dans la direction 1 qui est la même que la direction de laminage) est simulé en considérant un comportement élastoplastique parfait (dans ce cas toutes les composantes de la matrice d'interaction $\mathbf{a}$ sont nulles). Par conséquent, toutes les composantes du tenseur des contraintes de Cauchy sont nulles à l'exception de Σ_{11}. L'évolution de la contrainte de traction Σ_{11} en fonction de E_{11} est tracée sur la Fig. 2.3. Cette composante de contrainte atteint une valeur maximale de 107,3 MPa. Par conséquent, le rapport entre cette contrainte maximale et la cission critique initiale τ_0 est égal à 2,68. Une analyse similaire a été faite par Yoshida et al. (2009) en utilisant une structure cristallographique de type CFC et ils ont trouvé un rapport de 2,82, soit une augmentation de 5% par rapport à la valeur obtenue dans le cas présent. Cet écart, qui reste relativement faible, peut être interprété par la différence des structures cristallographiques et des textures initiales utilisées dans les prédictions.

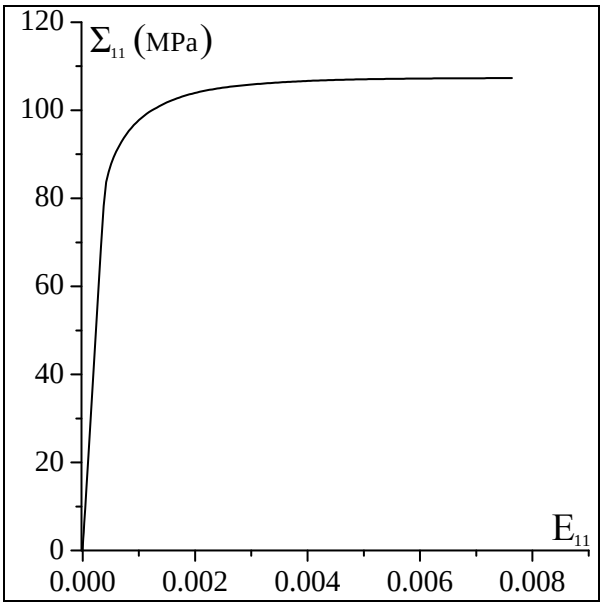


Fig. 2.3. Courbe contrainte–déformation pour un essai de traction uniaxiale obtenue avec le modèle autocohérent (sans prise en compte de l'écrouissage).

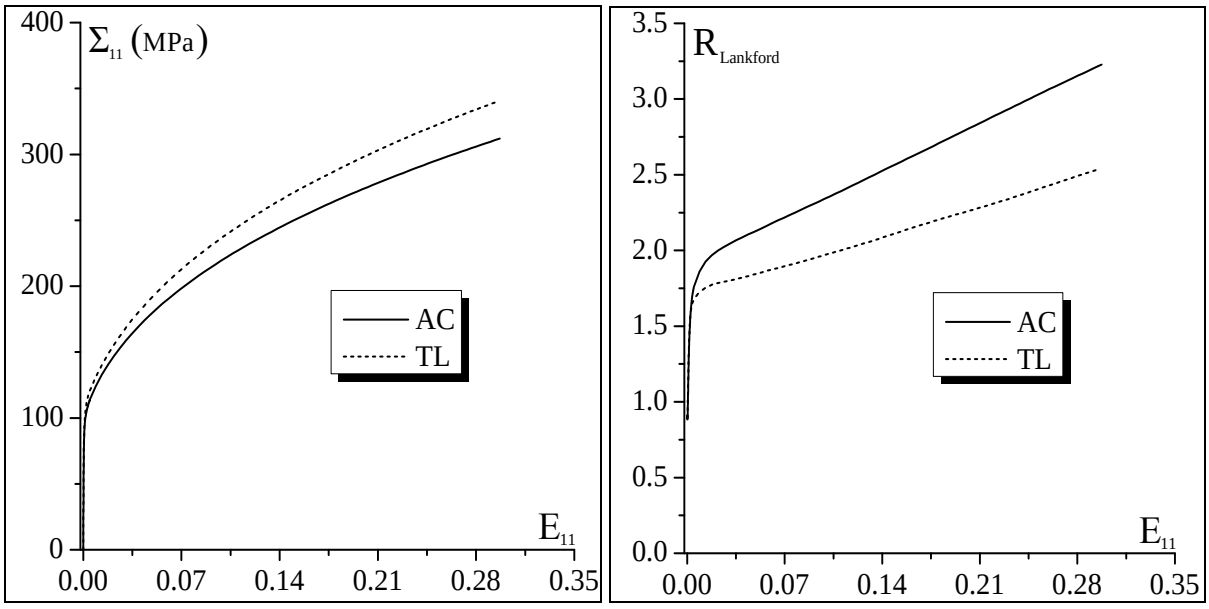
Les prédictions obtenues en appliquant le modèle autocohérent (noté plus brièvement 'AC' dans la suite) sont comparées avec celles obtenues en utilisant le modèle de Taylor–Lin (noté plus brièvement 'TL' dans la suite) dans la Fig. 2.4. Pour obtenir les courbes de la Fig. 2.4, nous avons simulé un essai de traction uniaxiale dans la direction 1. La Fig. 2.4(a) montre l'évolution de la composante Σ_{11} en fonction de la déformation logarithmique longitudinale E_{11}. On peut remarquer que le modèle autocohérent prédit une réponse beaucoup moins rigide que celle obtenue par le modèle de Taylor–Lin

et que l'écart en contrainte augmente avec la déformation E_{11}. Étant donné que la déformation élastique est généralement très faible dans le cas des matériaux métalliques, on peut légitimement penser que c'est surtout la déformation plastique qui accroit cet écart. La tendance trouvée contraste cependant avec certains résultats de la littérature, en particulier ceux de Lorrain (2005) et Franz (2008), où une comparaison similaire a été faite. Le modèle autocohérent utilisé dans leurs travaux respectifs est basé sur une formulation assez proche de celle que nous proposons. La seule différence notable réside dans les relations constitutives du monocristal. En effet, le choix d'une forme "pseudo-viscoplastique" du critère de Schmid a été adopté dans leurs cas et nous pensons que le contraste des tendances observées peut essentiellement s'expliquer par ce choix. Néanmoins, il est largement admis que le modèle de Taylor–Lin constitue une borne supérieure dans la prise en compte des interactions entre l'échelle microscopique et l'échelle macroscopique et à ce titre permet d'obtenir une courbe contrainte–déformation beaucoup plus raide que celle obtenue avec le modèle autocohérent (Hutchinson, 1970 ; Molinari et al., 1987 ; Molinari et al., 1997 ; Takahashi, 1998 ; Nebozyn et al., 2001 ; Yoshida et al., 2009). Cela conforte donc la fiabilité du modèle implanté.

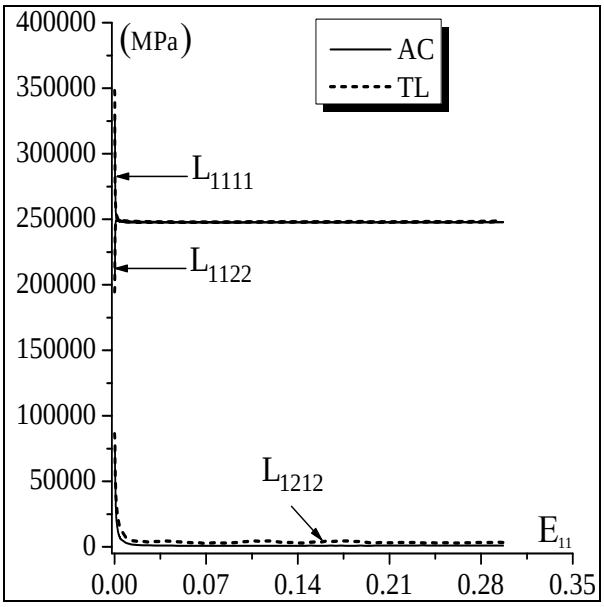
La Fig. 2.4(b) montre l'évolution du coefficient de Lankford en fonction de E_{11}. Il faut rappeler que le coefficient de Lankford est défini comme étant le rapport entre la déformation logarithmique plastique suivant la direction transversale E_{22}^{p} et la déformation logarithmique plastique suivant la direction normale E_{33}^{p}. Cependant, comme la partie élastique de la déformation est très faible devant la partie plastique, on peut supposer que le coefficient de Lankford est égal au rapport entre la déformation logarithmique totale suivant la direction transversale E_{22} et la déformation logarithmique totale suivant la direction normale E_{33}. Ce coefficient de Lankford caractérise l'anisotropie induite par des déformations plastiques dans le matériau. Cette anisotropie induite est le résultat de l'évolution de l'orientation cristallographique des différents grains. À cela s'ajoute l'effet de la texture morphologique des grains décrite par l'évolution des ratios des demi-axes ainsi que les orientations relatives des repères des déformations principales. On peut remarquer que le modèle autocohérent prédit une anisotropie relativement élevée par rapport au modèle de Taylor–Lin. En effet, pour une déformation $E_{11} = 0,3$, le coefficient de Lankford est égal à 3,22 pour le modèle autocohérent contre 2,54 pour le modèle de Taylor–Lin. Ce résultat s'explique simplement par l'hétérogénéité de la déformation entre les grains qui est prise en compte par le modèle autocohérent et pas par le modèle de Taylor–Lin qui suppose que la déformation est homogène. Ainsi la désorientation relative des réseaux cristallographiques des grains, qui est le principal facteur responsable de l'évolution de l'anisotropie plastique, est beaucoup moins prononcée dans le cas du modèle de Taylor–Lin que dans celui du modèle autocohérent.

La Fig. 2.4(c) montre l'évolution de trois composantes représentatives du module tangent macroscopique $\mathbf{L}$ $(L_{1111}, L_{1122}, L_{1212})$ en fonction de E_{11}. Les autres composantes

$L_{iiii}\,(i=2,3)$; $L_{iijj}\,(i,j=1,2,3)$ et $L_{ijij}\,(i,j=1,2,3)$ évoluent de la même manière que les composantes L_{1111}, L_{1122} et L_{1212}, respectivement. On peut remarquer, qu'indépendamment du modèle de transition d'échelles utilisé, les évolutions de ces composantes du module tangent macroscopique sont similaires à celles obtenues à l'échelle du monocristal (voir la Section 1.5.2), à savoir une réduction de la composante L_{1111}, une augmentation de la composante L_{1122} (au point de se rapprocher de la composante L_{1111}) et surtout une réduction significative de la composante de cisaillement L_{1212}. Cette tendance a également été observée par Lipinski (1993) dans le cas de matériaux CFC sollicités par un chargement séquentiel (une traction uniaxiale jusqu'à 0,004 de déformation dans la direction 1, suivie d'une décharge élastique puis d'une deuxième sollicitation en traction uniaxiale dans la direction 2). Par ailleurs, sur la Fig. 2.4(c), on remarque aussi que les sauts observés sur l'évolution des composantes du module tangent microscopique, et qui sont dus au caractère discret du critère de Schmid classique (Fig. 1.17), sont largement atténués à l'échelle macroscopique par l'effet des opérations d'homogénéisation. Cela est tout à fait compatible avec la physique des matériaux où l'écoulement élastoplastique est discret à l'échelle microscopique et continu à l'échelle macroscopique. On remarque également que le module de cisaillement L_{1212} prédit par le modèle autocohérent est moins élevé que celui obtenu avec le modèle de Taylor–Lin : pour une déformation E_{11} égale à 0,3, on prédit une valeur de 1030 MPa avec le modèle autocohérent contre une valeur de 3437 MPa avec le modèle de Taylor–Lin. Cette différence de valeur a une influence considérable sur les niveaux et les formes des courbes limites de formage obtenues en utilisant les différents critères de localisation (Chapitre 3).



(a) (b)



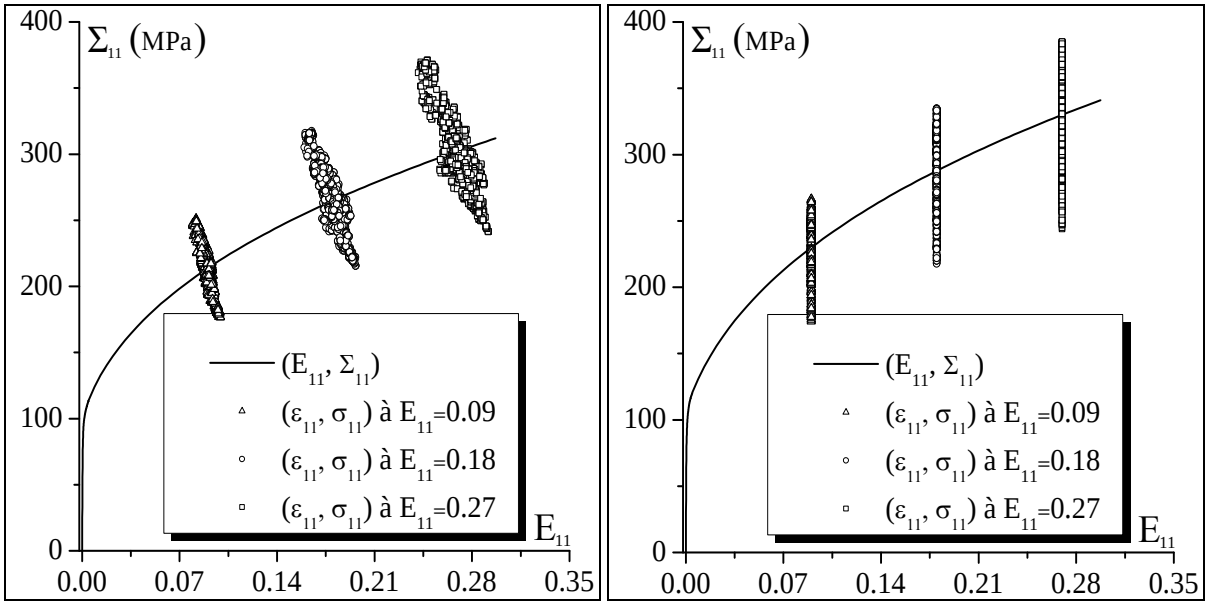
(c)

Fig. 2.4. Effet du schéma de transition d'échelles (le modèle autocohérent noté 'AC' et le modèle de Taylor–Lin noté 'TL') sur l'évolution de quelques grandeurs mécaniques macroscopiques lors d'un essai de traction uniaxiale : (a) contrainte macroscopique de traction ; (b) coefficient de Lankford ($R_{Lankford}$) ; (c) composantes représentatives du module tangent macroscopique.

Dans les paragraphes précédents, nous avons analysé l'effet du schéma de transition d'échelles sur la réponse macroscopique du polycristal. Dans la suite, nous étudierons l'effet de ces schémas sur l'évolution et la répartition de quelques grandeurs microscopiques pertinentes (contrainte et déformation microscopiques, texture cristallographique et morphologique, activité moyenne des systèmes de glissement). La Fig. 2.5 illustre la distribution de la contrainte microscopique σ_{11} et de la déformation microscopique ε_{11} dans le polycristal. Ces distributions sont affichées à trois niveaux de déformation macroscopique différents : $E_{11} = 0,09$, $E_{11} = 0,18$ et $E_{11} = 0,27$. Sur la Fig. 2.5(a), on peut remarquer qu'avec le modèle autocohérent, la composante ε_{11} de la déformation logarithmique microscopique varie d'un grain à l'autre, alors que cette déformation est constante lorsqu'on utilise le modèle de Taylor–Lin comme illustré sur la Fig. 2.5(b). Ce résultat est parfaitement cohérent avec les différentes hypothèses qui régissent les deux modèles de transition d'échelles. En effet, les tenseurs de déformation logarithmiques sont calculés en fonction des gradients de transformation microscopiques qui, à leur tour, dépendent directement des gradients de vitesse microscopiques (voir la relation (1.57) du Chapitre 1 pour plus de détails). Le modèle de Taylor–Lin est basé sur l'hypothèse de l'égalité entre les gradients de vitesse microscopiques $\mathbf{g}^I$ des différents grains et le gradient de vitesse macroscopique $\mathbf{G}$. Par conséquent, les tenseurs de déformation logarithmique de tous les grains ont la même valeur que le tenseur de déformation logarithmique macroscopique. L'hypothèse sur laquelle repose le modèle autocohérent est plus réaliste, car elle permet de prendre en compte l'hétérogénéité

de la déformation entre les différents grains à travers l'introduction et l'utilisation du tenseur de localisation $\mathbf{A}^{\mathrm{I}}$ (voir l'équation (2.42)). Ainsi, chaque grain I se distingue de son voisin par le gradient de vitesse $\mathbf{g}^{\mathrm{I}}$ qui lui est appliqué et cela se traduit par une hétérogénéité de la déformation logarithmique à l'échelle locale. Une mesure de l'écart relatif entre la déformation macroscopique E_{11} et la déformation microscopique ε_{11} est donnée dans le Tab. 2.2. Dans ce tableau, $\varepsilon_{11\max}$ (resp., $\varepsilon_{11\min}$) désigne la plus grande (resp., la plus petite) valeur de ε_{11} sur tous les grains. En analysant les résultats du Tab. 2.2, on peut remarquer que l'écart relatif entre les déformations microscopiques des grains et la déformation macroscopique se resserre légèrement au fur et à mesure que la déformation macroscopique augmente. En revanche, l'écart entre les déformations microscopiques augmente en fonction de la déformation, comme on peut le constater sur la Fig. 2.5(a). Cette dernière tendance a été observée par Lipinski (1995) et Lorrain (2005).

Une indication sur l'évolution et la distribution des contraintes microscopiques résiduelles peut être obtenue en analysant la Fig. 2.5. Nous rappelons que la contrainte résiduelle d'un grain I est définie comme étant la différence entre la contrainte microscopique $\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{I}}$ et la contrainte macroscopique de Cauchy $\boldsymbol{\Sigma}$ (autrement dit la contrainte résiduelle vaut $\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{I}} - \boldsymbol{\Sigma}$). On peut ainsi remarquer qu'avec le modèle autocohérent (Fig. 2.5(a)), la répartition des contraintes microscopiques est plus ou moins symétrique par rapport à la contrainte macroscopique. Ainsi, le nombre de grains ayant des contraintes résiduelles en traction ($\sigma_{11}^{\mathrm{I}} - \Sigma_{11} > 0$) est à peu près égal au nombre de grains ayant des contraintes résiduelles en compression ($\sigma_{11}^{\mathrm{I}} - \Sigma_{11} < 0$). Avec le modèle de Taylor–Lin la tendance est différente. En effet, on peut observer à partir de la Fig. 2.5(b) que le nombre de grains ayant des contraintes résiduelles en traction est inférieur au nombre de grains ayant des contraintes résiduelles en compression. Pour s'en rendre compte de manière plus évidente, il suffit de remarquer que l'écart des contraintes microscopiques se situant au-dessus de la contrainte macroscopique est plus faible que l'écart des contraintes microscopiques se situant en dessous. Sachant que tous les grains ont la même fraction volumique, et que la contrainte macroscopique est égale à la moyenne volumique des contraintes microscopiques, il y a forcément beaucoup plus de grains qui ont une contrainte résiduelle négative que de grains qui ont une contrainte résiduelle positive. Au vu du caractère orthotrope de la texture initiale du polycristal considéré, ainsi que du caractère isotrope de l'écrouissage microscopique, nous pensons que l'estimation du modèle autocohérent est la plus réaliste.



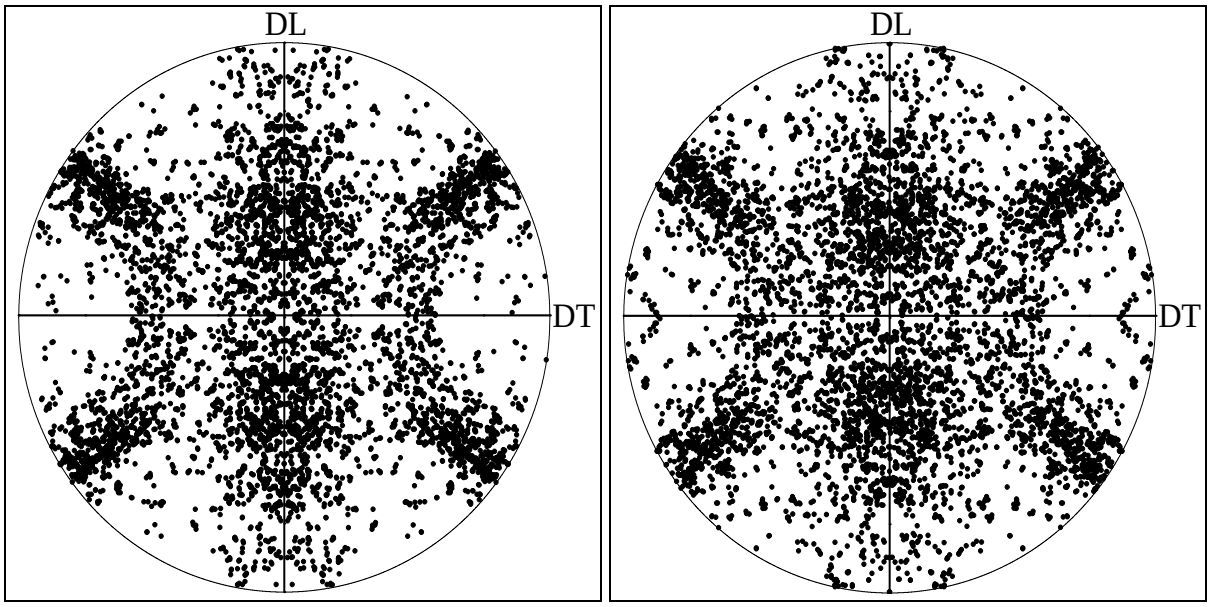
(a) (b)

Fig. 2.5. Effet du schéma de transition d'échelles sur la distribution des contraintes et déformations microscopiques lors d'un essai de traction uniaxiale : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

Niveau de la déformation E_{11}	0,09	0,18	0,27
$\varepsilon_{11\min} - E_{11}$	–11,6 %	–10,7 %	–10,5 %
$\varepsilon_{11\max} - E_{11}$	10,62 %	9,2 %	8 %

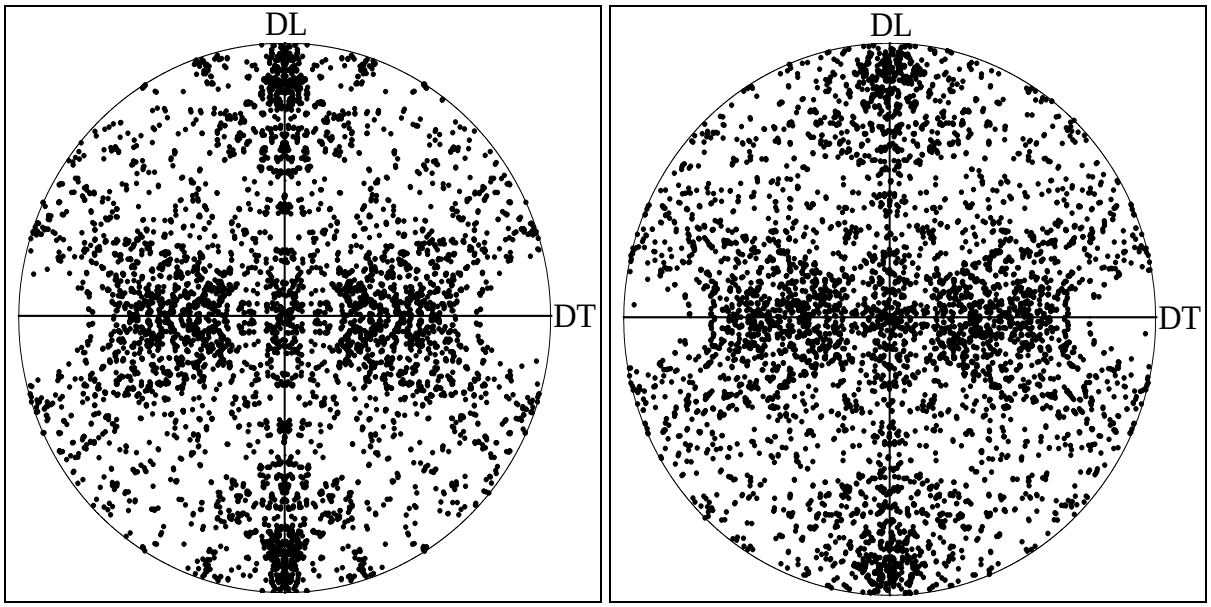
Tab. 2.2. Mesure de l'écart relatif entre la déformation macroscopique E_{11} et les déformations microscopiques ε_{11}.

Les figures de pôles {111} (resp., {110}) obtenues après une déformation $E_{11} = 0,3$ en utilisant le modèle autocohérent et le modèle de Taylor–Lin sont montrées sur la Fig. 2.6 (resp., Fig. 2.7). Nous avons comparé nos figures de pôles de type {111} de la Fig. 2.6 avec celles obtenues par Lipinski (1993) qui a déterminé le même type de figures pour un matériau CFC. La tendance qu'il a observée est similaire à celle que nous obtenons. En effet, on distingue trois rangées dont les deux extrêmes sont incurvées et la rangée centrale verticale. On peut par ailleurs comparer les prédictions obtenues par le modèle autocohérent à celles obtenues avec le modèle de Taylor–Lin. Les deux modèles prédisent des textures distinctes. En effet, avec le modèle autocohérent on obtient une texture plus accentuée que celle obtenue par le modèle de Taylor–Lin (Fig. 2.6).



(a) (b)

Fig. 2.6. Effet du schéma de transition d'échelles sur la figure de pôles {111} du polycristal après une traction uniaxiale à 0,3 de déformation longitudinale : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

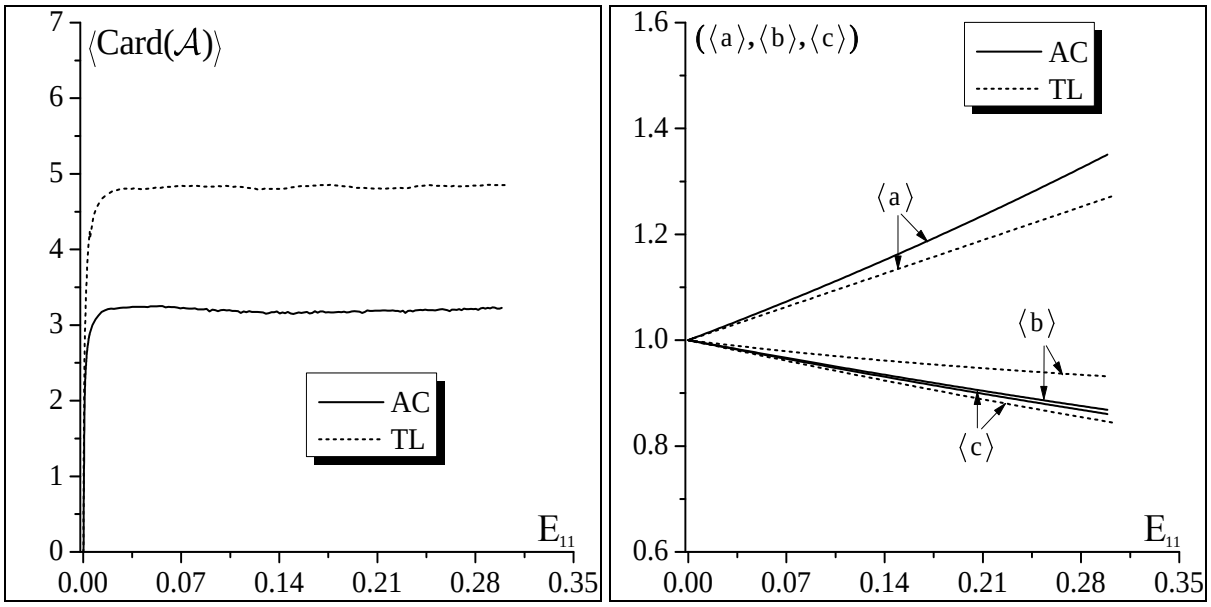


(a) (b)

Fig. 2.7. Effet du schéma de transition d'échelles sur la texture cristallographique décrite par la figure de pôles {110} du polycristal après une traction uniaxiale à 0,3 de déformation longitudinale : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

Une autre caractéristique importante de la structure interne du matériau est l'activité des systèmes de glissement. Cette activité a une très forte influence sur le comportement macroscopique du polycristal. En effet, les modules tangents microscopiques ainsi que les contraintes microscopiques des différents grains qui constituent le polycristal dépendent directement de l'ensemble des systèmes actifs qui

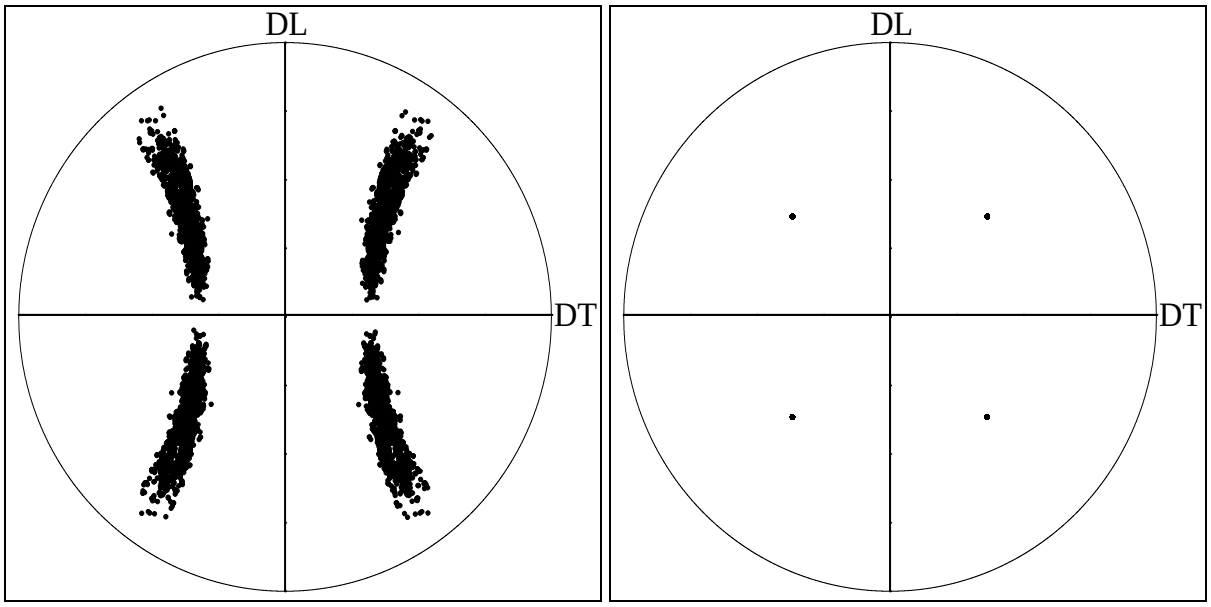
engendrent l'écoulement élastoplastique. Le module tangent macroscopique et la contrainte macroscopique de Cauchy, qui sont égaux aux moyennes volumiques de leurs homologues microscopiques, dépendent donc de cette activité des systèmes. La Fig. 2.8(a) montre l'évolution de la moyenne volumique du nombre de systèmes actifs prédit par chacun des deux modèles de transition d'échelles, en fonction de la déformation logarithmique suivant la direction longitudinale E_{11}. On peut observer que le nombre de systèmes actifs déterminé par le modèle autocohérent est beaucoup plus faible que celui prédit par le modèle de Taylor–Lin. Après stabilisation de l'activité des systèmes, on a en effet une valeur moyenne de 3,2 pour le modèle autocohérent contre une valeur moyenne de 4,8 pour le modèle de Taylor–Lin. Le nombre de systèmes actifs relativement faible du modèle autocohérent peut expliquer la faible rigidité de la réponse contrainte–déformation que l'on observe à l'échelle macroscopique (Fig. 2.4(a)). Il en est de même pour les valeurs des composantes de cisaillement du module tangent macroscopique qui sont beaucoup plus faibles lorsqu'elles sont déterminées par le modèle autocohérent. La Fig. 2.8(b) montre l'évolution des moyennes volumiques des demi-axes des grains en fonction de E_{11} déterminée par les deux modèles de transition d'échelles utilisés. Nous rappelons que les valeurs des demi-axes des grains dépendent de leurs gradients de transformation et par conséquent de leurs gradients de vitesse. Il faut également rappeler qu'avec le modèle de Taylor–Lin, les gradients de vitesse des différents grains sont égaux au gradient de vitesse macroscopique. On observe que la moyenne volumique du demi-axe a, qui est colinéaire à l'axe du chargement (de la traction uniaxiale), augmente tandis que celles des deux autres demi-axes diminuent. Cette tendance est tout à fait compatible avec le chargement imposé et elle est similaire aux résultats obtenus par Lorrain (2005) qui a cependant restreint son étude à un seul grain. On remarque également qu'indépendamment du modèle de transition d'échelles utilisé, les grains se déforment quasiment à volume constant. En effet, avec le modèle autocohérent et à un niveau de déformation E_{11} égal à 0,3, les moyennes volumiques des demi-axes a, b et c sont égales à 1,35, 0,87 et 0,87, respectivement. Le volume moyen des grains reste donc égal à celui de la sphère unité (de rayon 1). Avec le modèle de Taylor–Lin, on observe la même tendance où $\langle a \rangle = 1,27$, $\langle b \rangle = 0,93$ et $\langle c \rangle = 0,85$. Ce résultat confirme la physique des matériaux métalliques qui suppose que la déformation élastoplastique est quasiment incompressible. Lorsqu'on compare le modèle autocohérent au modèle de Taylor–Lin, on remarque qu'avec le modèle autocohérent $\langle b \rangle = \langle c \rangle$. Comme pour le cas des contraintes résiduelles, nous pensons que cette tendance obtenue avec le modèle autocohérent est la plus réaliste, car la texture initiale est supposée orthotrope et l'écrouissage est supposé isotrope.



(a) (b)

Fig. 2.8. Effet du schéma de transition d'échelles (le modèle autocohérent noté 'AC' et le modèle de Taylor–Lin noté 'TL') sur l'évolution de quelques variables décrivant la structure interne du polycristal prédites lors d'un essai de traction uniaxiale : (a) moyenne du nombre de systèmes actifs ; (b) moyenne des demi-axes des grains.

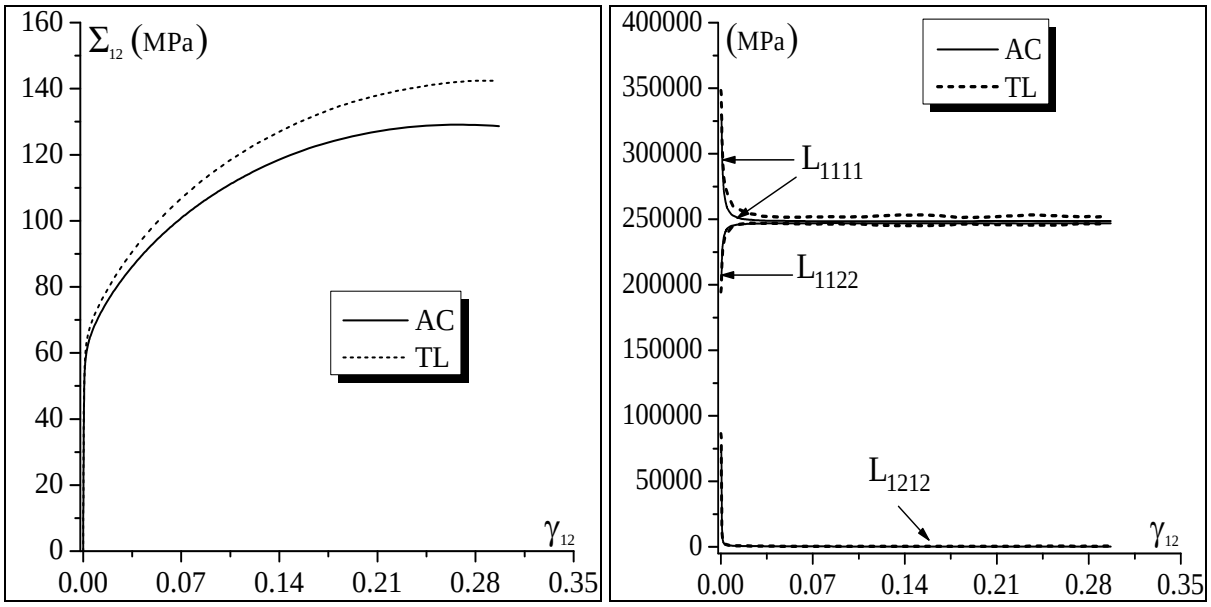
La texture morphologique du polycristal se caractérise non seulement par l'évolution des demi-axes des grains, mais aussi par leurs désorientations morphologiques relatives. Ainsi, nous montrons sur la Fig. 2.9 les projections stéréographiques des orientations des repères des déformations principales des grains (par rapport au repère du laboratoire) suivant le plan {111}. Comme l'on pourrait s'y attendre, tous les grains s'orientent de la même façon lorsqu'on utilise le modèle de Taylor–Lin (Fig. 2.9(b)). Cela est dû à l'hypothèse d'homogénéité de la déformation microscopique. Avec le modèle autocohérent par contre, la distribution des orientations morphologiques des grains est hétérogène.



(a) (b)

Fig. 2.9. Effet du schéma de transition d'échelles sur la texture morphologique du polycristal décrite par la figure de pôles {111} après un essai de traction uniaxiale à 0,3 de déformation longitudinale : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

La Fig. 2.10 montre quelques résultats macroscopiques relatifs à la simulation d'un essai de cisaillement. Sur ces figures également, les résultats obtenus par le modèle autocohérent sont comparés avec ceux obtenus par le modèle de Taylor–Lin. L'évolution de la contrainte macroscopique de cisaillement Σ_{12} en fonction de l'angle de cisaillement γ_{12} (égal à $2E_{12}$) est tracée sur la Fig. 2.10(a). Cette figure montre que la courbe contrainte–déformation obtenue par le modèle autocohérent est beaucoup moins rigide que celle obtenue par le modèle de Taylor–Lin. Cette tendance est similaire à celle observée lors de la simulation de l'essai de traction uniaxiale. Sur la Fig. 2.10(b), on observe une réduction importante de la composante de cisaillement du module tangent.



(a) (b)

Fig. 2.10. Effet du schéma de transition d'échelles (le modèle autocohérent noté 'AC' et le modèle de Taylor–Lin noté 'TL') sur l'évolution de quelques grandeurs mécaniques macroscopiques pour le cas d'un essai de cisaillement simple : (a) contrainte de cisaillement macroscopique ; (b) composantes représentatives du module tangent macroscopique.

2.4.3 Sensibilité au modèle d'élasticité

Dans cette section, la sensibilité du comportement macroscopique au type d'élasticité est étudiée. Dans ce cas, deux modèles d'élasticité sont utilisés et les prédictions correspondantes sont comparées : l'élasticité orthotrope définie par les paramètres élastiques suivants : $C_{11} = 1{,}353E_0$, $C_{12} = 1{,}091E_0$, $C_{44} = 0{,}576E_0$ et $E_0 = 210\,\text{GPa}$, et l'élasticité isotrope définie par les valeurs suivantes des coefficients de Lamé : $\lambda = 121{,}15\,\text{GPa}$ et $\mu = 80{,}77\,\text{GPa}$. Il faut remarquer que le module d'Young correspondant à ces coefficients de Lamé est égal à $210\,\text{GPa}$. La texture cristallographique du polycristal utilisé dans cette étude est la même que celle donnée sur la Fig. 2.2. Le modèle autocohérent et le modèle de Taylor–Lin sont respectivement utilisés pour prédire les réponses macroscopiques du polycristal.

Dans un premier temps, un essai de traction uniaxiale est simulé. Les courbes de traction relatives à ces simulations sont données sur la Fig. 2.11. On peut remarquer que la réponse contrainte–déformation est très peu influencée par le type d'élasticité. En effet, les deux courbes ne se distinguent qu'à des niveaux précoces de déformation, où la réponse obtenue en utilisant l'élasticité orthotrope est légèrement moins rigide que celle obtenue par l'élasticité isotrope. Dans le domaine des grandes déformations en revanche, les courbes contrainte–déformation obtenues par les deux types d'élasticité sont pratiquement identiques. En comparant les Fig. 2.11(a) et Fig. 2.11(b), on peut déduire que ce résultat est indépendant du modèle de transition d'échelles utilisé. Ce résultat valide le choix d'un

modèle élastique isotrope largement suivi dans la littérature (Molinari et al., 1997 ; Kuroda et Tvergaard, 2000 ; Yoshida et al., 2007 ; Yoshida et al., 2009 ; Franz et al., 2013).

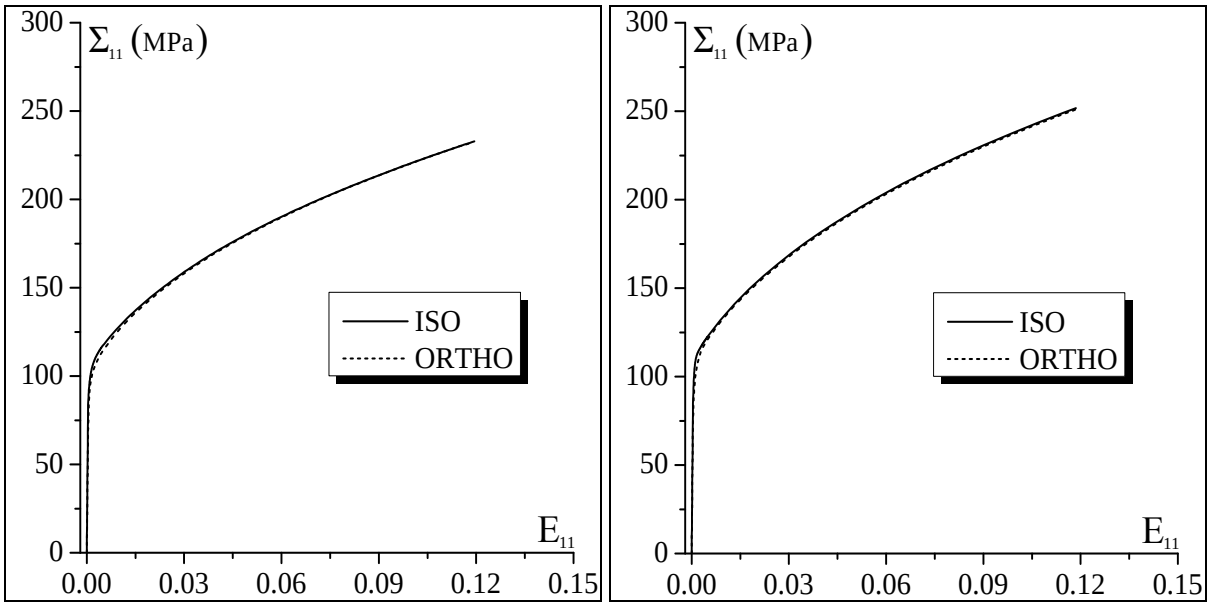
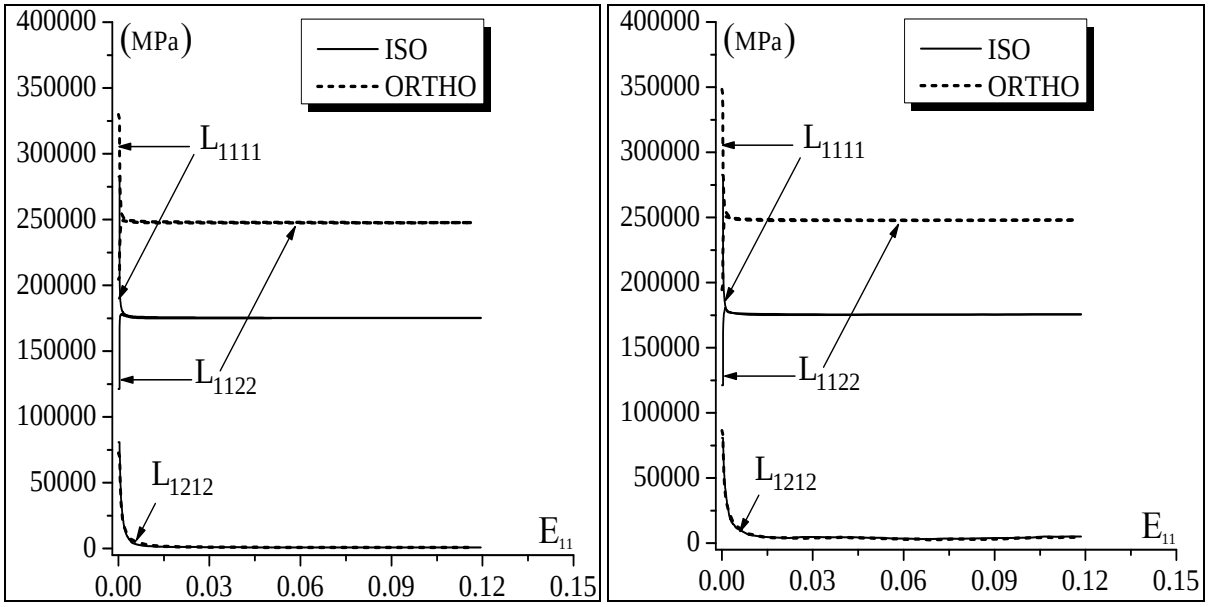


Fig. 2.11. Effet du modèle d'élasticité (élasticité isotrope notée 'ISO' et élasticité orthotrope notée 'ORTHO') sur l'évolution de la contrainte macroscopique de traction : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

La Fig. 2.12 montre l'évolution des composantes représentatives du module tangent macroscopique que l'on obtient suivant le modèle d'élasticité utilisé. On peut remarquer que les deux modèles d'élasticité donnent des résultats qualitativement similaires. En effet, bien que les tendances globales soient maintenues, à savoir une diminution des composantes L_{1111}, une augmentation des composantes L_{1122} et une réduction significative des composantes L_{1212}, on remarque qu'avec un modèle d'élasticité isotrope les composantes L_{1111} et L_{1122} ont des valeurs beaucoup plus faibles que leurs homologues déterminées avec une modèle orthotrope. Ainsi, sur la Fig. 2.12(a), où le modèle autocohérent est utilisé, on obtient à $E_{11} = 0.12$ une valeur $L_{1111} = 175256\,\text{MPa}$ et $L_{1122} = 175173\,\text{MPa}$ avec une élasticité isotrope contre $L_{1111} = 247704\,\text{MPa}$ et $L_{1122} = 247622\,\text{MPa}$ avec une élasticité orthotrope. Sur la Fig. 2.12(b), où le modèle de Taylor–Lin est utilisé, les composantes L_{1111} et L_{1122} valent respectivement 174687 MPa et 174433 MPa pour une déformation $E_{11} = 0.12$ lorsque l'élasticité est isotrope et leurs homologues déterminées en considérant une élasticité orthotrope valent respectivement $L_{1111} = 248126\,\text{MPa}$ et $L_{1122} = 247882\,\text{MPa}$. Si les valeurs des composantes L_{1111} et L_{1122} varient en fonction du type d'élasticité utilisée, la composante de cisaillement L_{1212} par contre est très peu sensible au type d'élasticité. En effet, avec le modèle autocohérent, on obtient à $E_{11} = 0{,}12$ une valeur $L_{1212} = 831\,\text{MPa}$ lorsqu'on utilise l'élasticité isotrope et une valeur $L_{1212} = 871\,\text{MPa}$ avec l'élasticité orthotrope (voir la Fig. 2.12(a)). Une tendance légèrement différente est obtenue avec le

modèle de Taylor–Lin (sur la Fig. 2.12(b)). En effet, la composante de cisaillement L_{1212} déterminée avec l'élasticité isotrope (5185 MPa à $E_{11} = 0{,}12$) est supérieure à celle obtenue dans le cas de l'élasticité orthotrope (4623 MPa à $E_{11} = 0{,}12$). Nous pensons néanmoins que ce résultat particulier ne saurait faire l'objet d'une généralisation.



(a) (b)

Fig. 2.12. Effet du modèle d'élasticité (élasticité isotrope notée 'ISO' et élasticité orthotrope notée 'ORTHO') sur l'évolution des composantes représentatives du module tangent macroscopique lors d'un essai de traction uniaxiale : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

Pour investiguer l'effet du modèle d'élasticité utilisé sur l'évolution de l'anisotropie induite du polycristal, nous avons tracé sur la Fig. 2.13 l'évolution du coefficient de Lankford en fonction de E_{11}. Avec le modèle autocohérent, on observe que le coefficient de Lankford calculé en utilisant une matrice d'élasticité orthotrope est inférieur à celui déterminé en utilisant un modèle d'élasticité isotrope dans la gamme des déformations relativement faibles, mais que l'écart entre les valeurs de ces deux coefficients se rapproche au fur et à mesure que la déformation augmente (voir la Fig. 2.13(a)). La même tendance est observée lorsque nous utilisons le modèle de Taylor–Lin comme schéma de transition d'échelles (Fig. 2.13(b)).

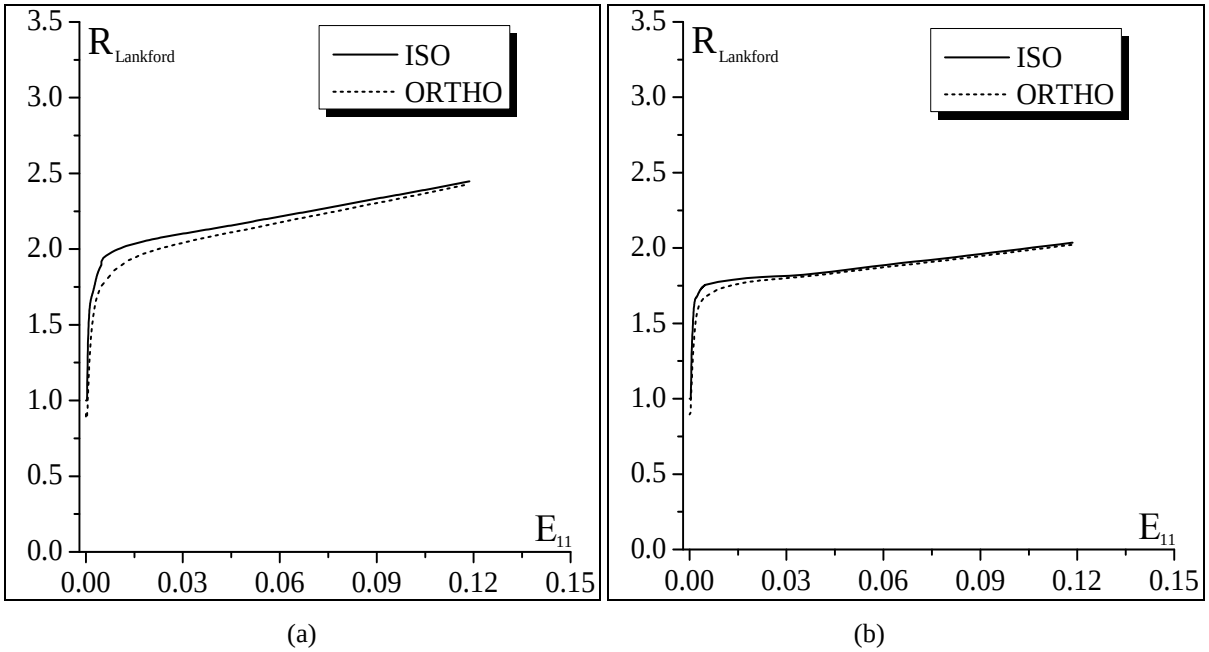
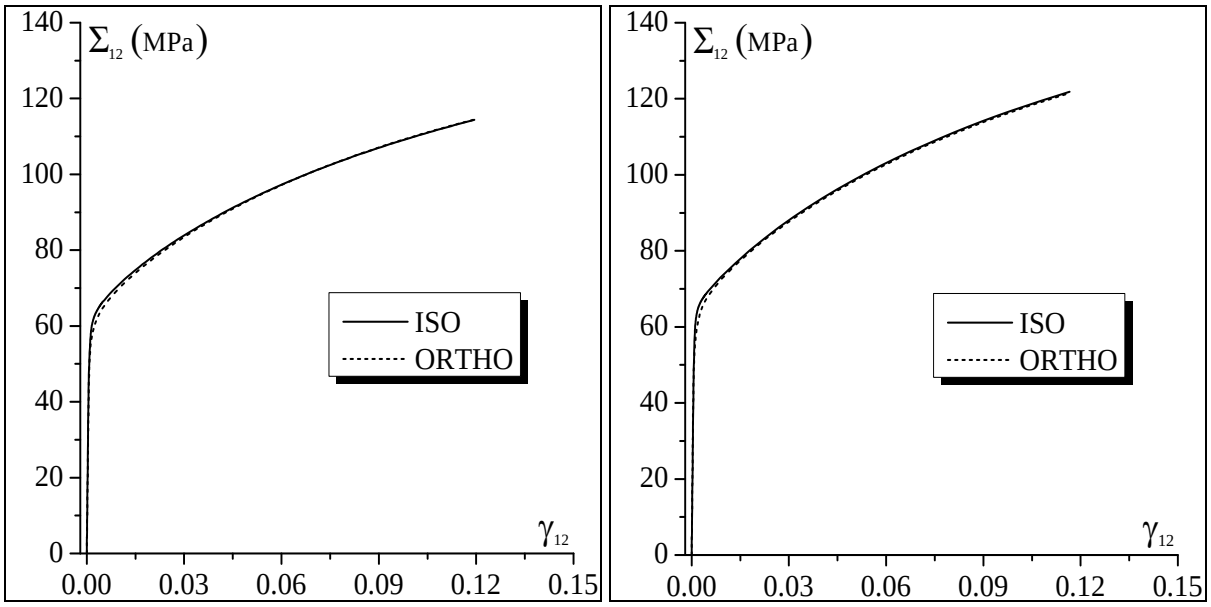


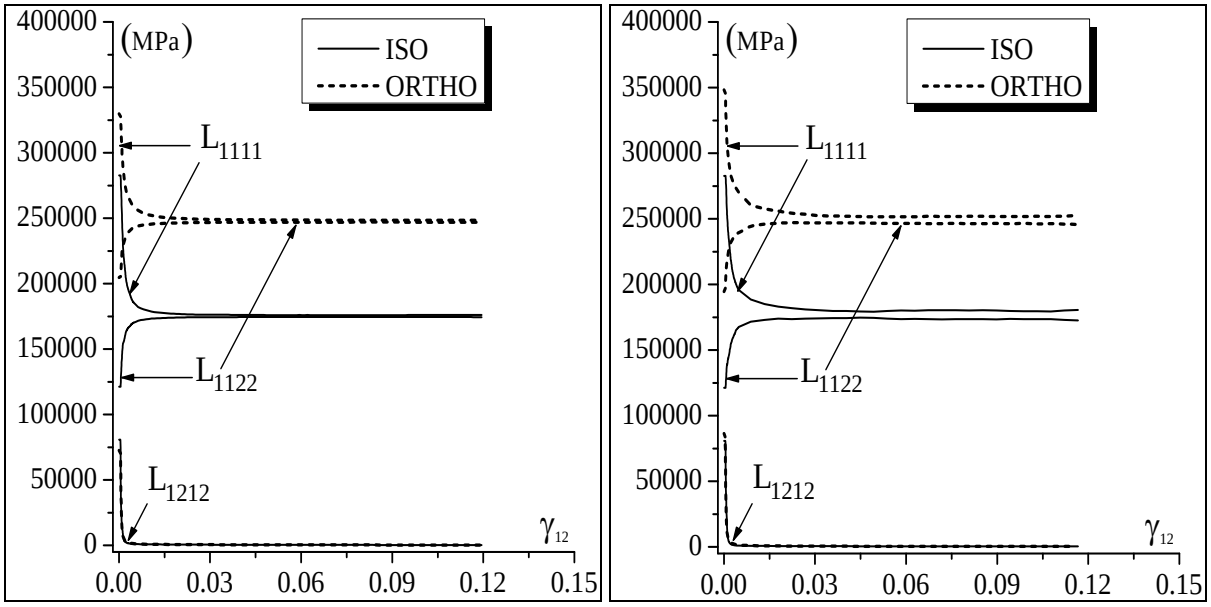
Fig. 2.13. Effet du modèle d'élasticité (élasticité isotrope notée 'ISO' et élasticité orthotrope notée 'ORTHO') sur l'évolution du coefficient de Lankford lors d'un essai de traction : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

L'influence du modèle d'élasticité sur la réponse macroscopique du polycristal est investiguée davantage en simulant cette fois-ci un essai de cisaillement simple. En observant les résultats de la Fig. 2.14, on remarque que les tendances précédemment obtenues dans le cas de la traction uniaxiale restent valables quand l'essai de cisaillement simple est simulé. En effet, on peut clairement constater que la réponse contrainte–déformation est très peu impactée par le type d'élasticité utilisé. Comme pour le cas de la traction uniaxiale, les légères différences liées au type d'élasticité sont observées dans le domaine des petites déformations. La Fig. 2.15 montre l'évolution des composantes représentatives du module tangent macroscopique en fonction de l'angle de cisaillement γ_{12} obtenues par les deux modèles d'élasticité utilisés. Conformément aux résultats obtenus lors de la simulation de l'essai de traction uniaxiale (voir la Fig. 2.11), on observe que les composantes L_{1111} et L_{1122} calculées en utilisant la matrice d'élasticité orthotrope ont des valeurs plus élevées que leurs homologues déterminées avec la matrice d'élasticité isotrope. En revanche, la composante de cisaillement L_{1212} demeure très peu sensible au type d'élasticité utilisé. Suite aux résultats de cette étude de sensibilité au modèle d'élasticité utilisé, qui indiquent une grande similitude entre les prédictions obtenues par l'élasticité isotrope et celles déterminées par l'élasticité orthotrope, il apparaît judicieux de ne considérer dans la suite de ce manuscrit que le cas de l'élasticité isotrope. Dans le Chapitre 3, nous montrerons que les prédictions des courbes limites de formage dépendent essentiellement des composantes de cisaillement du module tangent macroscopique qui varient très peu avec le type d'élasticité considéré.



(a) (b)

Fig. 2.14. Effet du modèle d'élasticité (élasticité isotrope notée 'ISO' et élasticité orthotrope notée 'ORTHO') sur l'évolution de la contrainte macroscopique de cisaillement : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.



(a) (b)

Fig. 2.15. Effet du modèle d'élasticité (élasticité isotrope notée 'ISO' et élasticité orthotrope notée 'ORTHO') sur l'évolution des composantes représentatives du module tangent macroscopique lors d'un essai de cisaillement simple : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

2.4.4 Sensibilité à l'écrouissage anisotrope

Dans la littérature, de nombreuses études basées sur des modèles multi-échelles supposent une évolution isotrope de l'écrouissage à l'échelle microscopique (Inal et al., 2005 ; Signorelli et al.,

2009 ; Yoshida et Kuroda, 2012 ; Tadano et al., 2013). Cette restriction peut avoir une répercussion sur le comportement macroscopique du matériau. Nous savons en réalité qu'à l'échelle locale, l'activation d'un système de glissement α induit une augmentation de sa cission critique (auto-écrouissage) qui est plus faible que celles des cissions critiques de tous les autres systèmes de glissement $\beta \neq \alpha$ (écrouissage latent). Toutes les simulations effectuées jusqu'alors dans ce chapitre sont basées sur l'hypothèse d'un écrouissage isotrope (où tous les paramètres de la matrice d'interaction valent 1) négligeant ainsi l'effet de l'écrouissage anisotrope sur la réponse macroscopique du polycristal. Nous étudions à présent l'influence de l'écrouissage anisotrope en considérant pour la matrice d'interaction (voir l'Annexe A pour plus de détails) les mêmes paramètres que ceux définis dans le Chapitre 1 (voir Tab. 1.3. de la Section 1.5). La Fig. 2.16 montre les courbes de traction obtenues en utilisant le modèle autocohérent et celui de Taylor–Lin. On peut remarquer qu'en prenant en compte l'influence de l'écrouissage anisotrope, on obtient une réponse plus rigide (que celle obtenue avec l'écrouissage isotrope). En effet, à $E_{11} = 0{,}12$, l'écart entre les contraintes est de 10% avec le modèle autocohérent (comme l'indique la Fig. 2.16(a)) et de 12% avec le modèle de Taylor–Lin (voir la Fig. 2.16(b)). On peut par ailleurs noter que la prise en compte de l'écrouissage anisotrope n'influence pas la nature plus rigide du modèle de Taylor–Lin comparé au modèle autocohérent. Le modèle de Taylor–Lin reste en effet une borne supérieure et l'on obtient à $E_{11} = 0{,}12$ une contrainte de 281 MPa avec le modèle de Taylor–Lin contre une valeur de 255 MPa avec le modèle autocohérent.

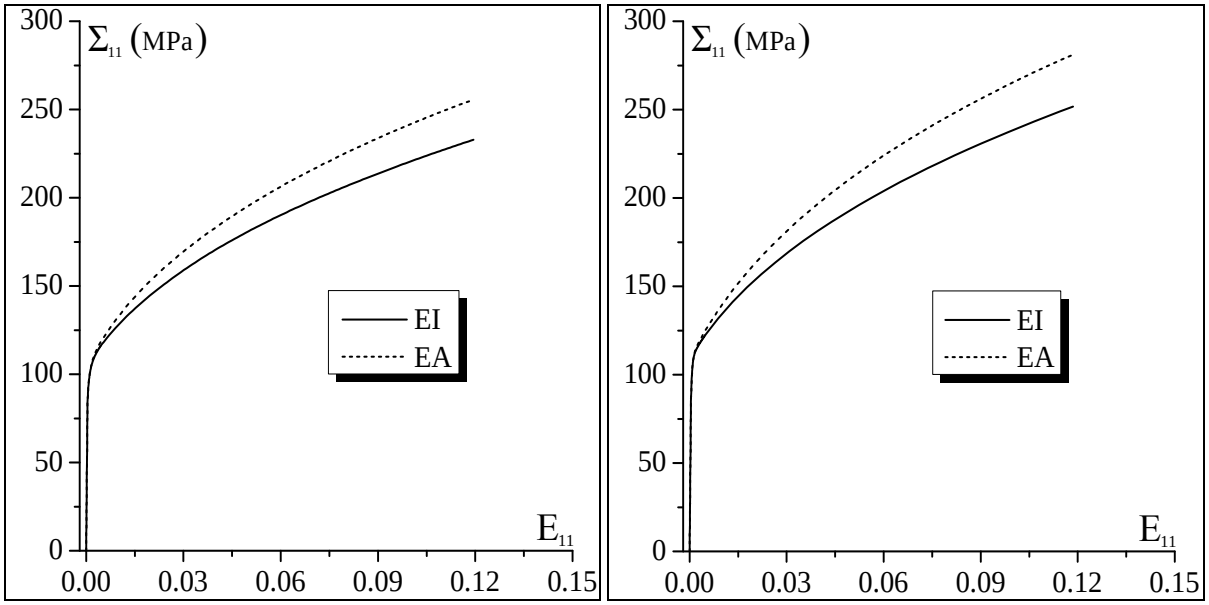


Fig. 2.16. Effet du modèle d'écrouissage (écrouissage isotrope noté 'EI' ou écrouissage anisotrope noté 'EA') sur l'évolution de la contrainte macroscopique de traction : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

La Fig. 2.17 montre des comparaisons similaires à l'étude précédente, en considérant cette fois-ci les composantes représentatives du module tangent macroscopique. Contrairement à la réponse contrainte–déformation, les composantes du module tangent sont très peu sensibles à l'écrouissage anisotrope. En effet, sur la Fig. 2.17(a), où le modèle autocohérent est adopté, pour une déformation longitudinale $E_{11} = 0{,}12$, la composante L_{1111} vaut 175256 MPa lorsqu'on considère une matrice d'écrouissage isotrope et elle varie très peu (175283 MPa) lorsque l'effet de l'écrouissage anisotrope est pris en compte. Il en est de même pour la composante L_{1122} qui est égale à 175173 MPa (resp., 175178 MPa) pour le cas de l'écrouissage isotrope (resp., anisotrope). L'écart entre les valeurs de la composante L_{1212} est légèrement supérieur à celui des deux autres composantes. On obtient en effet une valeur de 871 MPa avec un écrouissage isotrope contre 794 MPa lorsque l'écrouissage anisotrope est considéré. La Fig. 2.17(b) montre l'évolution des composantes représentatives du module tangent macroscopique obtenu lorsque le modèle de Taylor–Lin est utilisé comme schéma de transition d'échelle. La différence notable concerne la composante de cisaillement L_{1212}. À $E_{11} = 0{,}12$, on trouve en effet une valeur de 3842 MPa avec un modèle d'écrouissage isotrope et une valeur de 5185 MPa lorsque l'écrouissage anisotrope est pris en compte. Nous pensons néanmoins que cette variation non négligeable est un cas isolé.

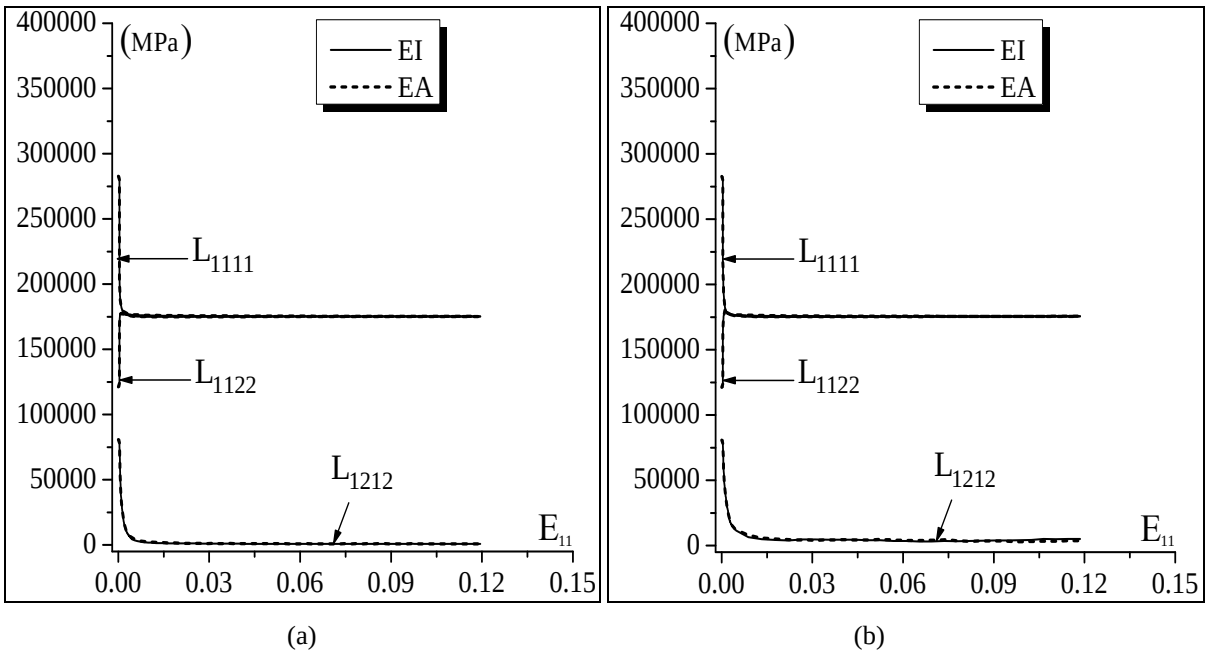


Fig. 2.17. Effet du modèle d'écrouissage (écrouissage isotrope noté 'EI' ou écrouissage anisotrope noté 'EA') sur l'évolution des composantes représentatives du module tangent macroscopique lors d'un essai de traction uniaxiale : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

Nous étudions également l'influence de l'écrouissage anisotrope sur l'anisotropie induite. Ainsi, la Fig. 2.18. montre l'évolution du coefficient de Lankford en fonction de la déformation longitudinale E_{11}. On peut observer que la prise en compte de l'écrouissage anisotrope influence notablement

l'évolution du coefficient de Lankford et que l'écart entre la valeur de ce coefficient déterminée avec la matrice d'écrouissage isotrope et la valeur déterminée avec la matrice relative à l'écrouissage anisotrope augmente en fonction de la déformation. Sur la Fig. 2.18(a) où le modèle autocohérent est utilisé, l'écart relatif est de $8,6\times10^{-2}\,\%$ lorsque $E_{11}=10^{-3}$ et de 13% lorsque $E_{11}=0,12$. Sur la Fig. 2.18(b), on observe avec le modèle de Taylor–Lin un écart relatif de $8,9\times10^{-2}\,\%$ lorsque $E_{11}=10^{-3}$ et de 18% lorsque $E_{11}=0,12$. Ainsi, comme l'on pouvait s'y attendre, la prise en compte de l'écrouissage anisotrope augmente l'anisotropie plastique du matériau.

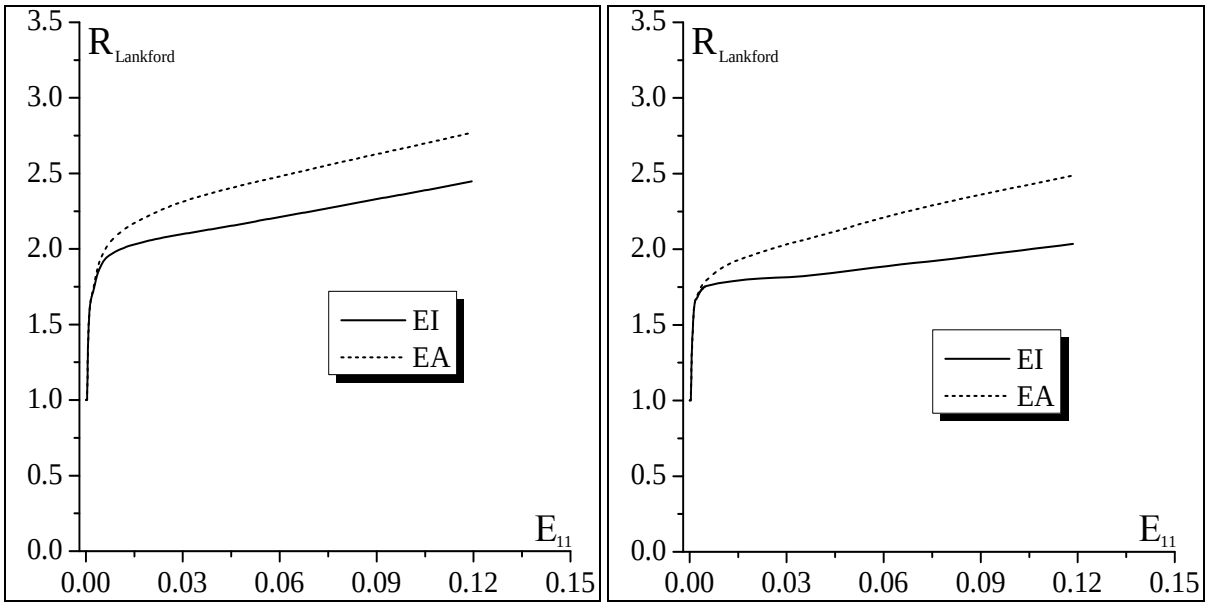
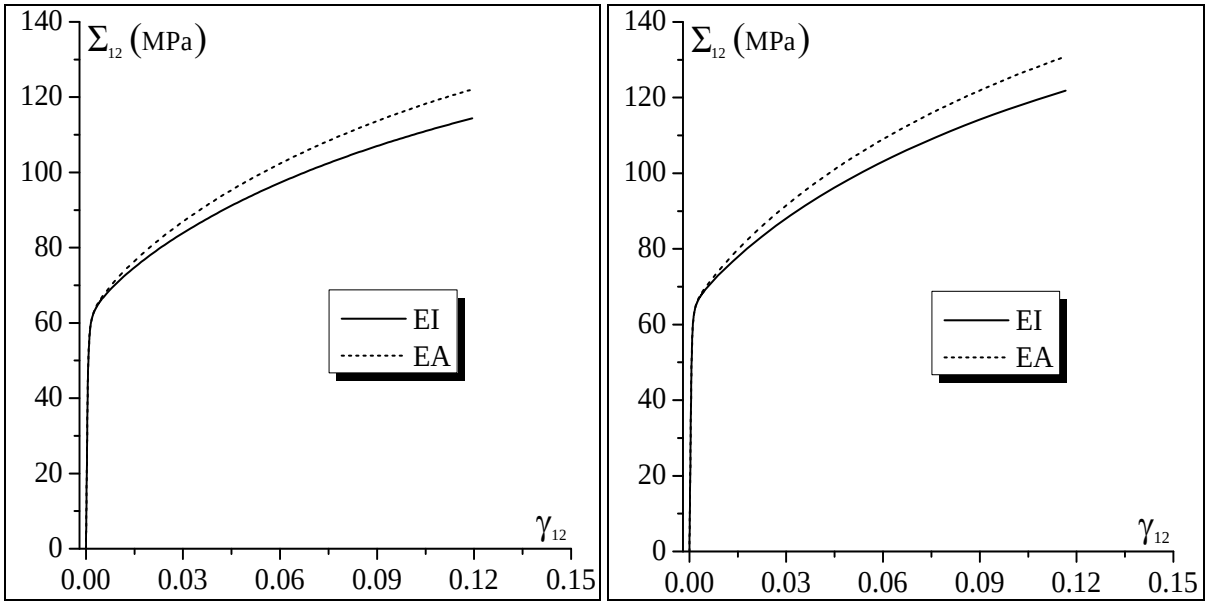


Fig. 2.18. Effet du modèle d'écrouissage (écrouissage isotrope noté 'EI' ou écrouissage anisotrope noté 'EA') sur l'évolution du coefficient de Lankford lors d'un essai de traction uniaxiale : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

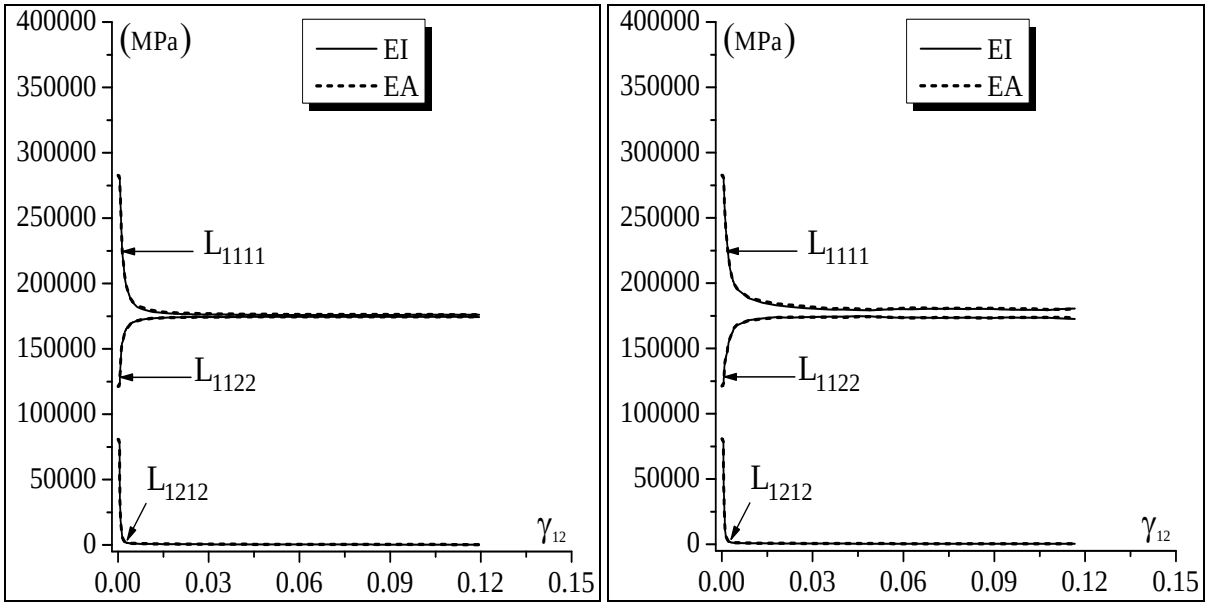
Nous poursuivons l'étude de l'influence de l'écrouissage anisotrope sur la réponse macroscopique du polycristal en analysant les résultats de la simulation d'un essai de cisaillement simple. La Fig. 2.19 montre l'évolution de la composantes Σ_{12} du tenseur des contraintes de Cauchy en fonction de l'angle de cisaillement γ_{12}. On peut remarquer que la forte influence de l'écrouissage anisotrope sur les courbes contrainte–déformation, constatée dans le cas de la traction uniaxiale, est toujours observée avec l'essai de cisaillement simple. Similairement au cas de la traction uniaxiale, l'écart entre les contraintes augmente en fonction du niveau de déformation.

La Fig. 2.20 montre l'évolution des composantes représentatives du module tangent macroscopique en fonction de l'angle de cisaillement γ_{12}. On peut remarquer que l'écrouissage anisotrope influence très peu l'évolution de ces composantes.



(a) (b)

Fig. 2.19. Effet du modèle d'écrouissage (écrouissage isotrope noté 'EI' ou écrouissage anisotrope noté 'EA') sur l'évolution de la contrainte macroscopique de cisaillement : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.



(a) (b)

Fig. 2.20. Effet du modèle d'écrouissage (écrouissage isotrope noté 'EI' ou écrouissage anisotrope noté 'EA') sur l'évolution des composantes représentatives du module tangent macroscopique lors d'un essai de cisaillement simple : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

Nous étudions dans la suite l'influence de l'écrouissage anisotrope sur la forme et la taille des surfaces de charge. En effet, les deux matrices d'écrouissage (dont la première est isotrope et la seconde prend en compte la différentiation des interactions entre les systèmes de glissement) sont utilisées pour déterminer l'évolution de la morphologie des surfaces de charge du polycristal à différents niveaux de

déformation plastique équivalente, en l'occurrence $0,05\%$, 1% et 5%. Pour déterminer ces surfaces de charge, les différents chargements imposés sont du même type que ceux introduits à l'échelle du monocristal. Ce sont des chargements en gradient de vitesse (macroscopiques cette fois) $\mathbf{G}_1, -\mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2, -\mathbf{G}_2$ tel que :

$$\mathbf{G}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \rho & 0 \\ 0 & 0 & -(1+\rho) \end{bmatrix} \left(s^{-1}\right) \quad ; \quad \mathbf{G}_2 = \begin{bmatrix} \rho & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -(1+\rho) \end{bmatrix} \left(s^{-1}\right) \tag{2.108}$$

où le paramètre ρ varie de -1 à 1 avec des pas $\Delta\rho$ de $0,02$. Il faut préciser qu'expérimentalement, les surfaces de charge sont déterminées en imposant des chargements à trajets de contrainte linéaires engendrant ainsi des trajets de déformation non-linéaires. L'application d'une telle procédure, basée sur un pilotage avec des trajets de contrainte linéaires, dans les prédictions numériques permet certainement de mieux simuler les essais expérimentaux mais induit quelques difficultés numériques. En effet, pour simuler un essai à trajet de contrainte linéaire, il faut déterminer itérativement le gradient de vitesse macroscopique correspondant à cet essai. Ce calcul itératif peut induire quelques problèmes de convergence et nécessite généralement un temps de calcul considérable. Pour éviter ces différents problèmes numériques, nous avons adopté la démarche inverse en imposant directement des chargements à gradient de vitesse macroscopique constant. L'approche que nous avons adoptée ne permet certainement pas d'obtenir une évolution très classique de la surface de charge, mais elle permet néanmoins de donner une bonne approximation de l'évolution de cette surface à moindre coût numérique. Étant donné que notre investigation est purement qualitative, nous avons retenu cette procédure de détermination de la surface de charge. La Fig. 2.21 montre les différents résultats obtenus en utilisant les deux modèles de transition d'échelles et en considérant un modèle d'écrouissage isotrope. Bien qu'à l'échelle du monocristal nous avons observé la présence de points de vertex sur les surfaces de charge (Fig. 1.16), induits par l'utilisation du critère de Schmid, nous pouvons remarquer que les surfaces de charge déterminées à l'échelle du polycristal ont une forme plus lisse et qu'elles s'approchent plus des surfaces de charges relatives aux modèles phénoménologiques classiques (von Mises…). On observe par ailleurs un écrouissage macroscopique isotrope qui se traduit par une évolution homothétique des surfaces de charge. Cette même tendance a été observée par Lipinski (1993). En effet, pour une texture initiale non marquée (voir la Fig. 2.2), et des contraintes internes initiales nulles, l'effet de l'écrouissage cinématique est très peu visible. Dans les résultats de Lipinski (1993), un effet Bauschinger est nettement plus visible lorsque le matériau subit une pré-déformation avant la détermination de ses surfaces de charge. L'effet Bauschinger est observé suivant l'axe de la pré-déformation.

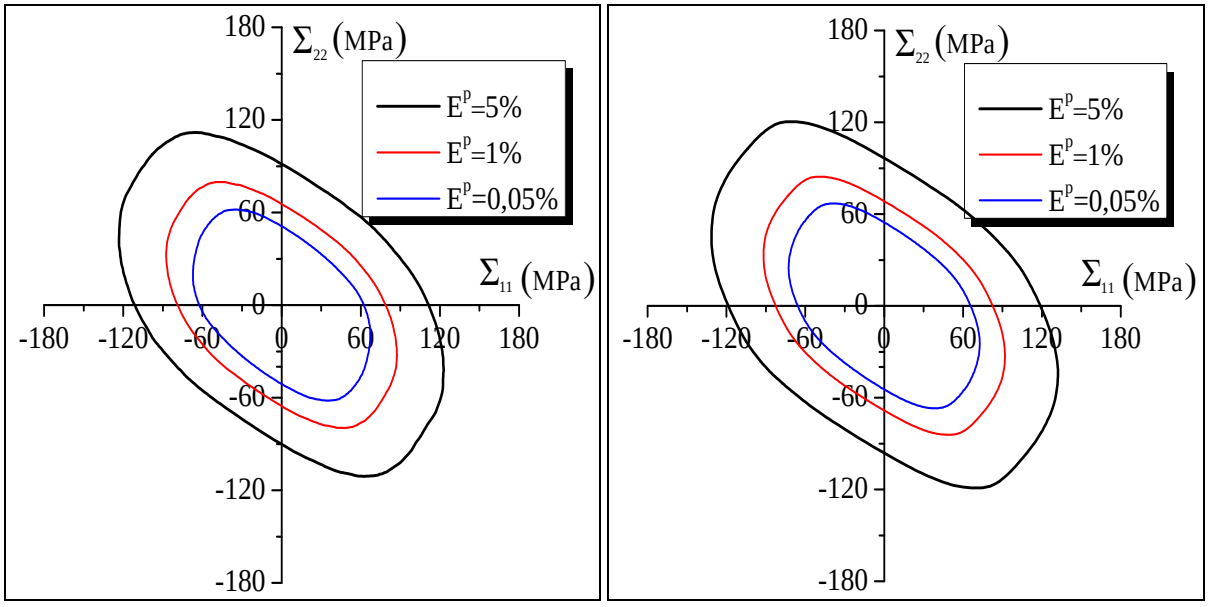


Fig. 2.21. Évolution de la morphologie de surface de charge du polycristal sans prise en compte de l'écrouissage anisotrope : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

Pour prédire les surfaces de charge de la Fig. 2.22, nous avons considéré le modèle d'écrouissage anisotrope. Les paramètres définissant la matrice d'interaction dans ce cas sont les mêmes que ceux donnés dans le Tab. 1.3 de la Section 1.5. En comparant les surfaces montrées sur la Fig. 2.21 avec celles données sur la Fig. 2.22, on peut conclure que l'écrouissage anisotrope a un léger effet sur la forme des surfaces de charge. Par ailleurs, c'est au niveau des amplitudes des composantes du tenseur des contraintes de Cauchy que la différence (entre l'écrouissage isotrope et l'écrouissage anisotrope) est la plus marquée. Cette tendance conforte les résultats illustrés sur les Fig. 2.16 et Fig. 2.19, à savoir que la prise en compte de l'écrouissage anisotrope engendre des contraintes beaucoup plus élevées.

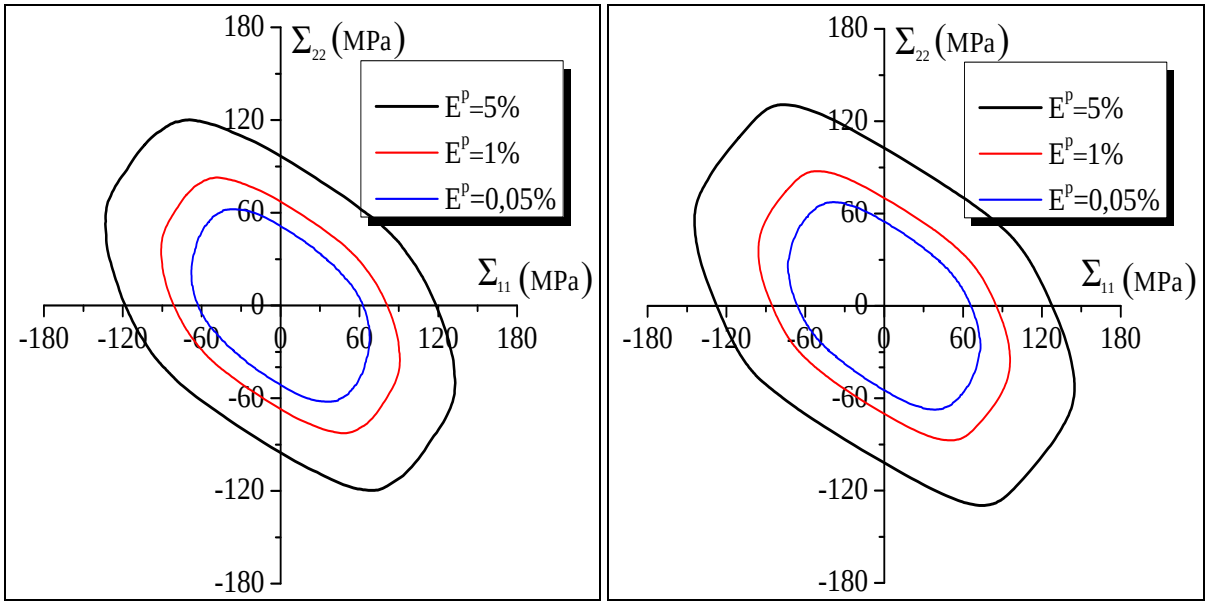
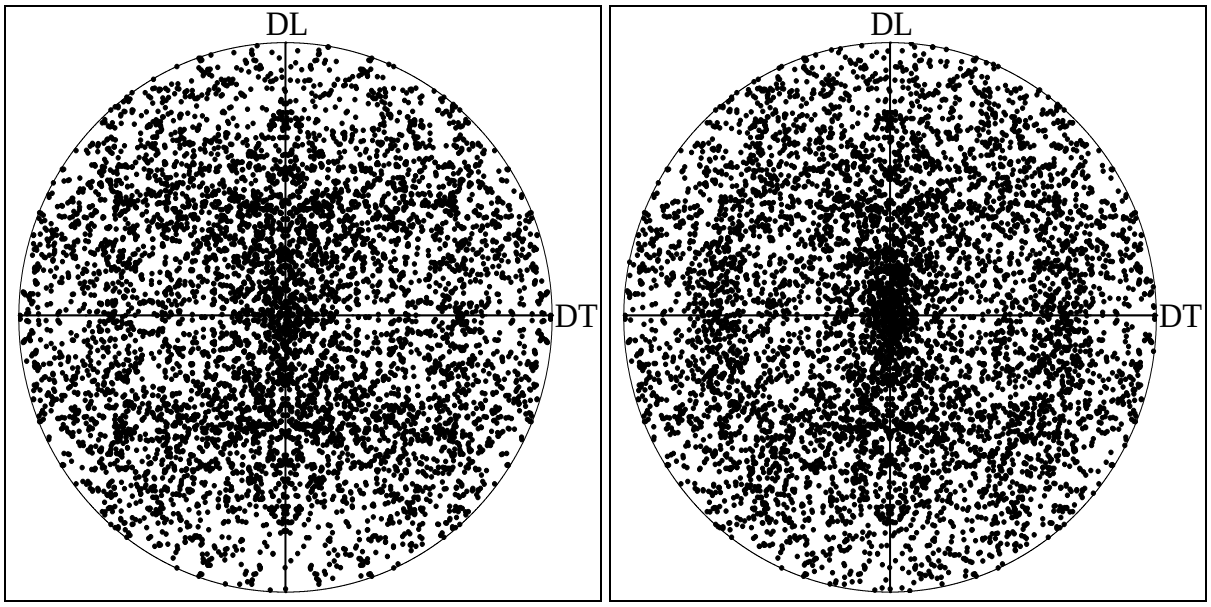


Fig. 2.22. Évolution de la surface de charge du polycristal avec une prise en compte de l'écrouissage anisotrope : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

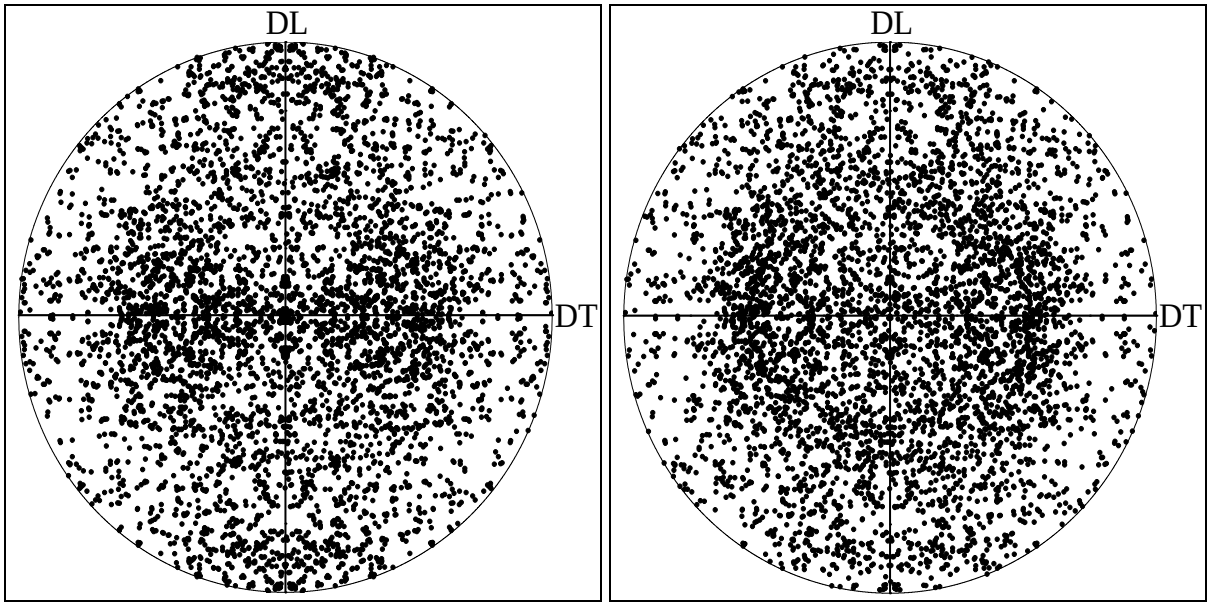
2.4.5 Sensibilité à la texture cristallographique initiale

Nous étudions dans cette section l'influence de la texture cristallographique initiale sur la réponse macroscopique du polycristal. À cet effet, la texture orthotrope introduite dans la Section 2.4.1 (voir la Fig. 2.2) est modifiée en remplaçant, respectivement, le quart et la moitié des orientations cristallographiques la constituant par de nouvelles orientations cristallographiques, permettant ainsi de générer deux nouvelles textures plus ou moins proches de la texture orthotrope initiale. Les textures modifiées sont nommées respectivement Texture "1" et Texture "2". La texture orthotrope initialement introduite est renommée Texture "0" et sert de référence pour les différentes comparaisons effectuées. Les Fig. 2.23 et Fig. 2.24 montrent les figures de pôles des textures modifiées suivant les plans {111} et {110}, respectivement.



(a) (b)

Fig. 2.23. Figures de pôles {111} : (a) Texture "1" ; (b) Texture "2".

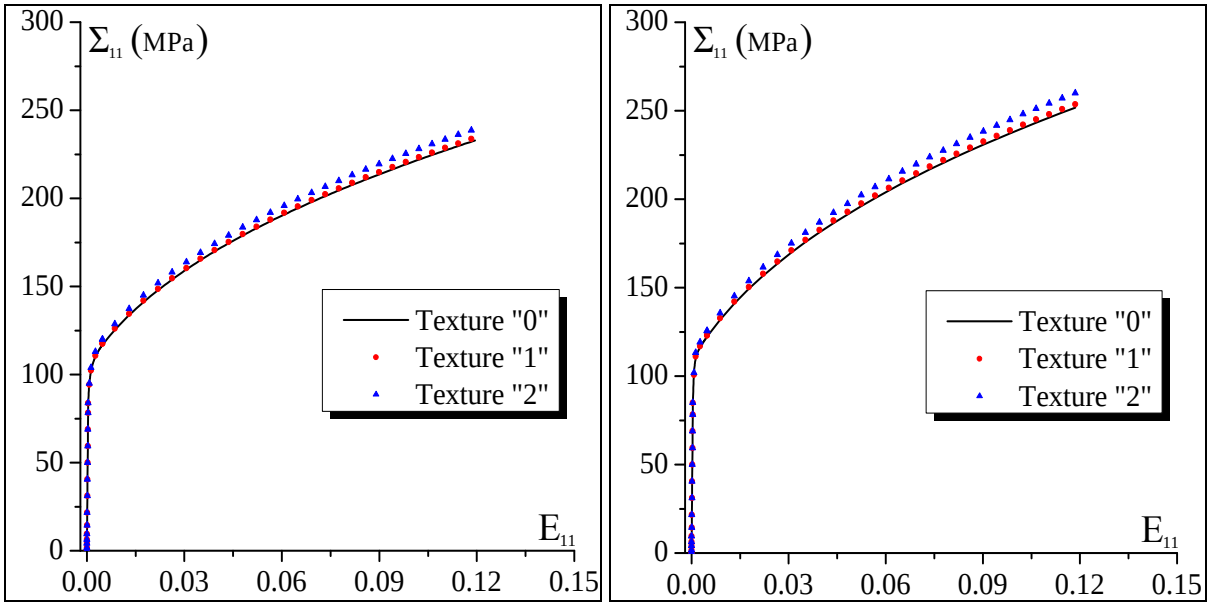


(a) (b)

Fig. 2.24. Figures de pôles {110} : (a) Texture "1" ; (b) Texture "2".

Un essai de traction uniaxiale est simulé en utilisant les textures nouvellement générées (Texture "1" et Texture "2"). Les résultats avec ces nouvelles textures sont comparés à ceux obtenus avec la texture de référence (Texture "0"). Nous précisons que pour les différentes simulations, l'élasticité et l'écrouissage sont supposés isotropes (avec les paramètres définis dans la Section 2.4.1). La Fig. 2.25 montre l'effet de la texture cristallographique initiale sur l'évolution de la contrainte de traction macroscopique. On peut observer que les courbes contrainte–déformation obtenues avec la Texture "1" s'approchent le plus des courbes contrainte–déformation obtenues avec la texture de référence

(Texture "0"). Ce résultat est conforme à nos attentes, car la Texture "1" a été générée en remplaçant le quart des orientations cristallographiques de la Texture "0", alors que dans le cas de la Texture "2", la moitié des orientations cristallographiques de la Texture "0" a été modifiée. Toutefois, il convient de noter que la sensibilité de la contrainte de traction macroscopique à la texture cristallographique initiale est relativement faible. En effet, avec le modèle autocohérent (Fig. 2.25(a)), on a pour une déformation $E_{11} = 0{,}12$, un écart relatif de $0{,}3\%$ avec la Texture "1", et $2{,}5\%$ avec la Texture "2". Lorsque le modèle de Taylor–Lin est utilisé (voir la Fig. 2.25(b)), l'écart est de $0{,}7\%$ avec la Texture "1", et $3{,}26\%$ avec la Texture "2".



(a) (b)

Fig. 2.25. Effet de la texture cristallographique initiale sur l'évolution de la contrainte macroscopique de traction : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

La Fig. 2.26 montre l'évolution des composantes représentatives du module tangent macroscopique en fonction de la déformation logarithmique suivant la direction longitudinale E_{11}. On peut remarquer qu'indépendamment du modèle de transition d'échelles choisi, la texture cristallographique influence très peu l'évolution des composantes du module tangent macroscopique.

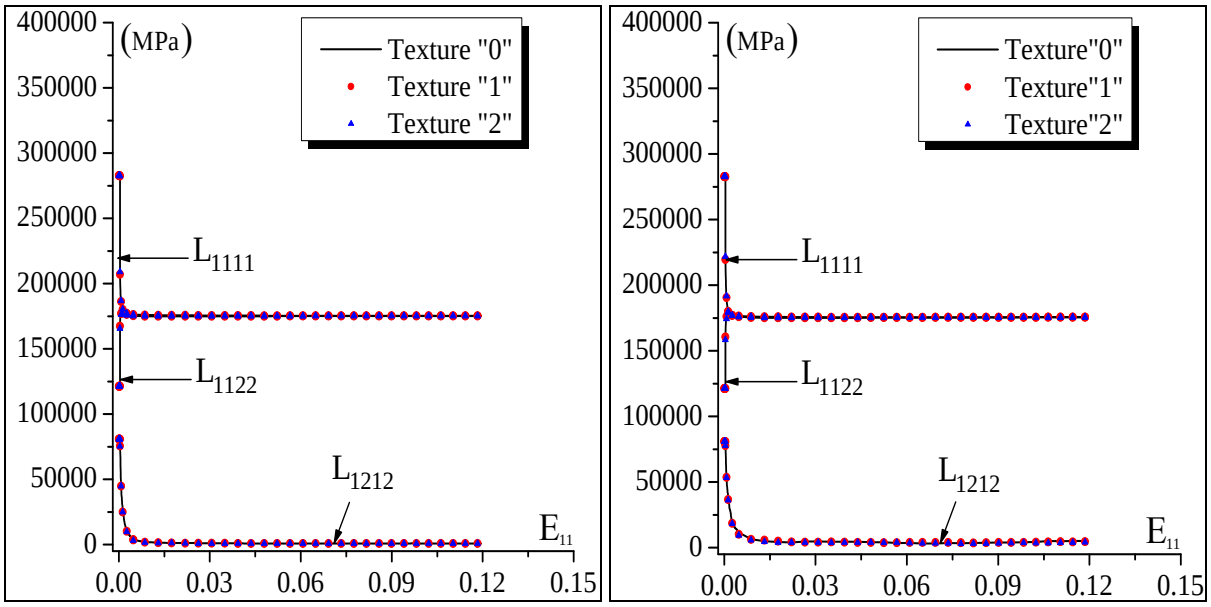


Fig. 2.26. Effet de la texture cristallographique initiale sur l'évolution des composantes représentatives du module tangent macroscopique lors d'un essai de traction uniaxiale : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

Pour évaluer l'influence de la texture initiale sur l'anisotropie induite du matériau, nous comparons sur la Fig. 2.27 les prédictions du coefficient de Lankford obtenues en utilisant les trois textures initiales différentes. Sur la Fig. 2.27(a), on peut remarquer que les trois textures permettent de prédire des évolutions très similaires du coefficient de Lankford et que la valeur de ce coefficient augmente avec le degré d'orthotropie de la texture. En effet, moins la texture est orthotrope, plus le coefficient de Lankford (et par conséquent l'anisotropie induite) diminue. Nous pensons ainsi qu'une texture parfaitement aléatoire devrait induire l'anisotropie la plus faible possible. Avec le modèle de Taylor–Lin (Fig. 2.27(b)), on observe une tendance assez proche à celle obtenue avec le modèle autocohérent (Fig. 2.27(a)). Cependant, l'écart entre le coefficient de Lankford lié à la Texture "0" et celui de la Texture "1" est assez faible. Il est d'environ $1,2\%$ contre $4,4\%$ avec le modèle autocohérent.

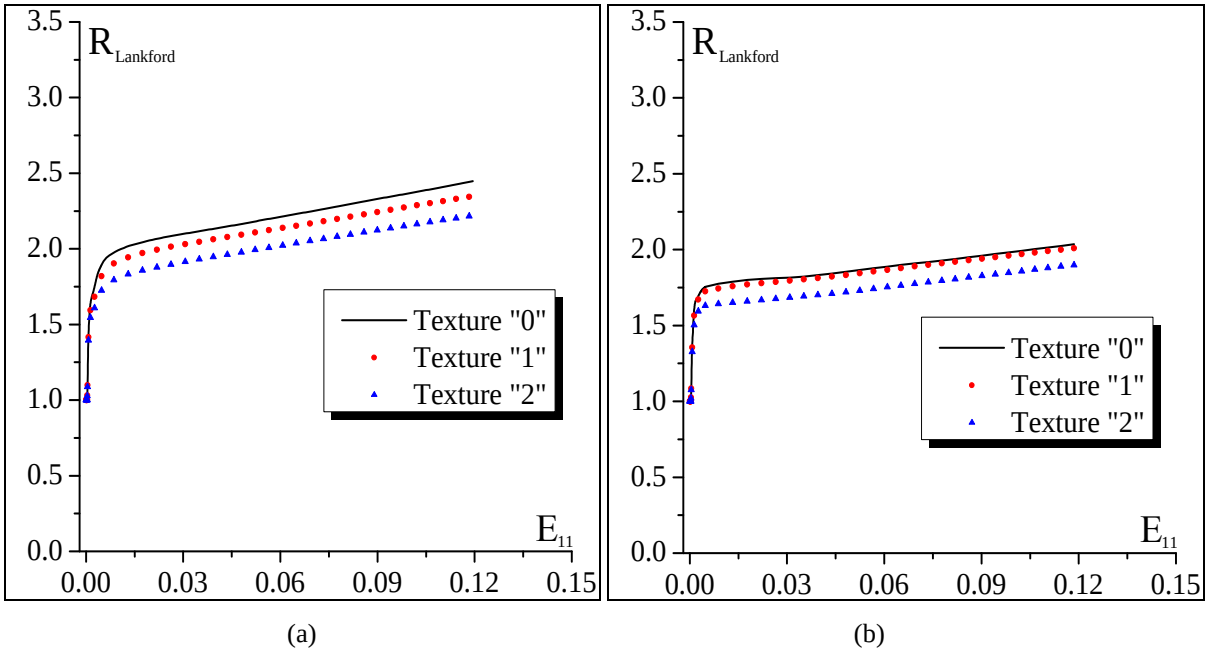


Fig. 2.27. Effet de la texture cristallographique initiale sur l'évolution du coefficient de Lankford : (a) modèle autocohérent : (b) modèle de Taylor–Lin.

L'anisotropie d'un matériau est expérimentalement évaluée en sollicitant plusieurs éprouvettes, découpées suivant différentes directions par rapport à la direction de laminage, en traction uniaxiale. Pour simuler ces essais, il suffit d'appliquer une rotation aux orientations cristallographiques initiales formant la texture du matériau, ainsi qu'une rotation des repères des directions principales de déformation des grains. En effet, supposons que nous avons un polycristal constitué par des grains I dont l'orientation cristallographique initiale est définie par la matrice $\mathbf{r}^{\mathrm{I}}$. Appliquer un essai de traction uniaxiale à ce polycristal dans une direction θ par rapport à la direction de laminage, revient à appliquer un essai de traction uniaxiale sur un polycristal équivalent dans la direction de laminage. L'orientation cristallographique initiale de chaque grain I de ce polycristal équivalent, notée $\mathbf{r}'^{\mathrm{I}}$, est liée à l'orientation $\mathbf{r}^{\mathrm{I}}$ (du polycristal initial) par la relation suivante :

$$\mathbf{r}'^{\mathrm{I}} = (\mathbf{R}_\theta)^{\mathrm{T}}.\mathbf{r}^{\mathrm{I}} \quad \text{avec} \quad \mathbf{R}_\theta = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{2.109}$$

Dans le cadre de cette étude, nous avons supposé que tous les grains ont une forme initiale sphérique. Par conséquent, les tenseurs de rotation $\mathbf{r}'^{\mathrm{I}}_{\mathrm{G}}$ des repères des directions principales de déformation des différents grains I par rapport au repère du laboratoire, sont initialement égaux au tenseur identité d'ordre 2. Ainsi, ces tenseurs de rotation $\mathbf{r}'^{\mathrm{I}}_{\mathrm{G}}$ n'ont aucune influence sur les prédictions. La Fig. 2.28 montre les courbes contrainte–déformation obtenues en simulant l'essai de traction uniaxiale appliqué dans trois directions différentes : $\theta = 0°$ (qui correspond à une traction dans la direction de laminage), $\theta = 45°$ et $\theta = 90°$. Les deux modèles de transition d'échelles prédisent des tendances similaires en

termes de courbe contrainte–déformation. En effet, la courbe contrainte–déformation déterminée pour le polycristal sollicité dans la direction $\theta = 45°$ est légèrement plus rigide que celle obtenue pour le polycristal sollicité dans la direction de laminage. Cette observation est valable pour les deux schémas de transition d'échelles, à savoir le modèle autocohérent (Fig. 2.28(a)) et le modèle de Taylor–Lin (Fig. 2.28(b)). En revanche, la courbe de traction prédite pour le polycristal sollicité dans la direction $\theta = 90°$ est nettement différente. On observe en effet une réponse beaucoup moins rigide que celle relative au polycristal sollicité dans la direction de laminage. Une étude similaire a été menée par Scacciatella (1993) qui a utilisé le modèle autocohérent pour prédire la courbe contrainte–déformation d'un polycristal de type CFC constitué de 100 grains sphériques dont les orientations cristallographiques initiales forment une texture isotrope et dont les contraintes microscopiques sont initialement nulles. Les résultats numériques qu'il a obtenus montrent que les trois courbes contrainte–déformation, obtenues par un essai de traction selon les trois directions, sont identiques. L'utilisation d'une texture orthotrope dans le cas présent pourrait expliquer la différence des réponses contrainte–déformation constatée surtout pour le polycristal sollicité selon la direction $\theta = 90°$.

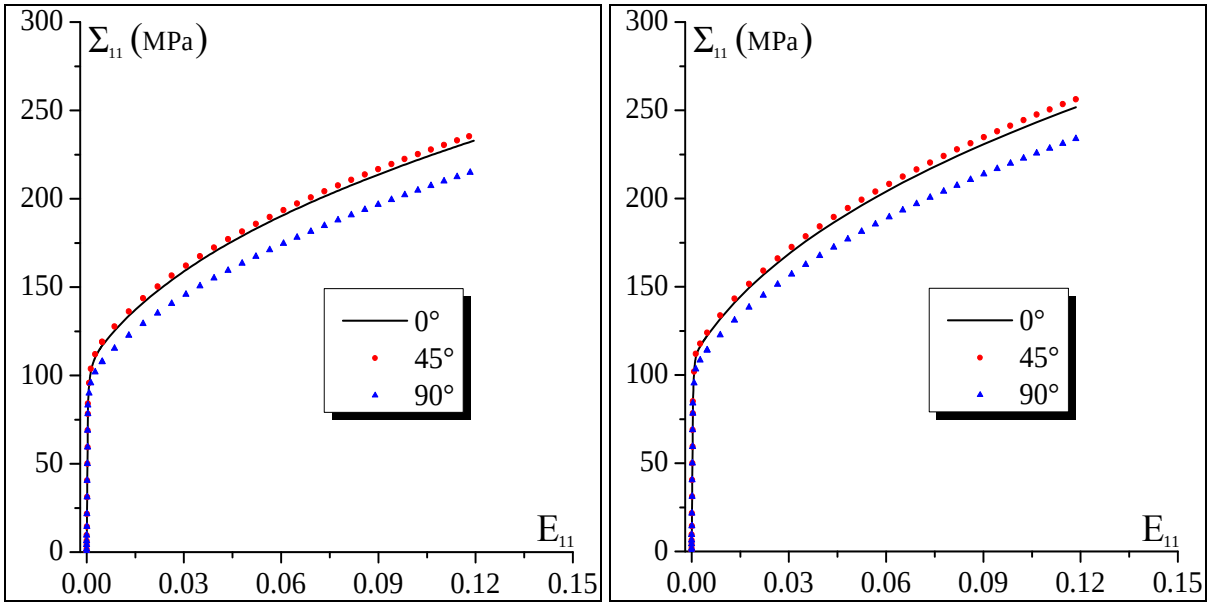
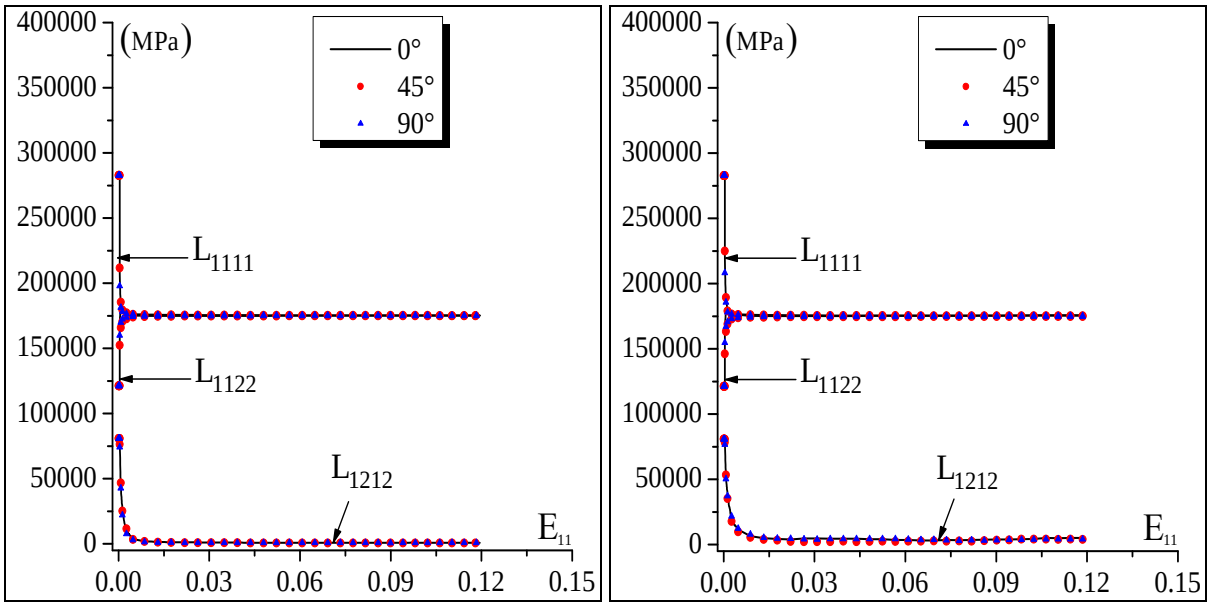


Fig. 2.28. Effet de la direction de chargement (par rapport à la direction de laminage) sur l'évolution de la contrainte de traction macroscopique : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

La Fig. 2.29 montre l'effet de la direction de traction sur l'évolution des composantes représentatives du module tangent macroscopique. On observe en fait très peu de différence entre les évolutions des modules tangents relatifs aux trois différentes orientations de traction (0°, 45° et 90°), aussi bien avec le modèle autocohérent qu'avec le modèle de Taylor–Lin.



(a) (b)

Fig. 2.29. Effet de la direction de chargement (par rapport à la direction de laminage) sur l'évolution des composantes représentatives du module tangent macroscopique : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

Sur la Fig. 2.30, nous étudions l'influence de la direction de traction sur l'anisotropie induite du matériau. On peut observer facilement que le coefficient de Lankford est fortement influencé par la direction de traction. En effet, pour les deux polycristaux sollicités dans les directions 45° et 90°, on remarque une évolution inverse du coefficient de Lankford par rapport au polycristal sollicité dans la direction de laminage. Cette tendance est commune aux deux modèles de transition d'échelles.

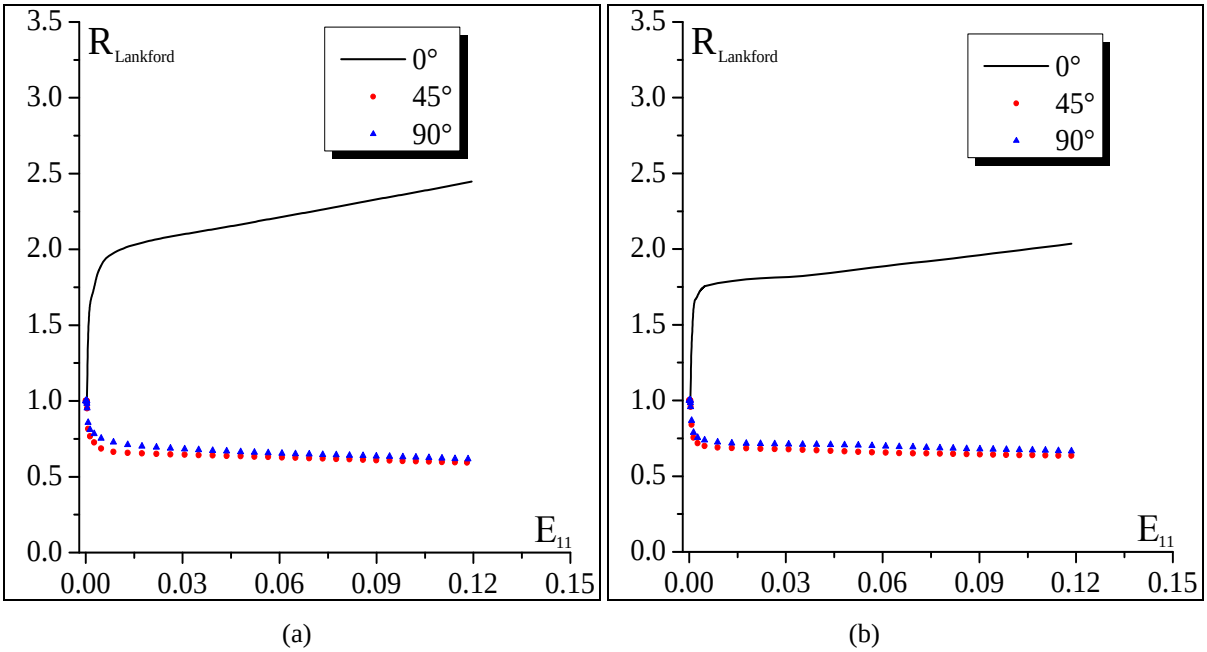
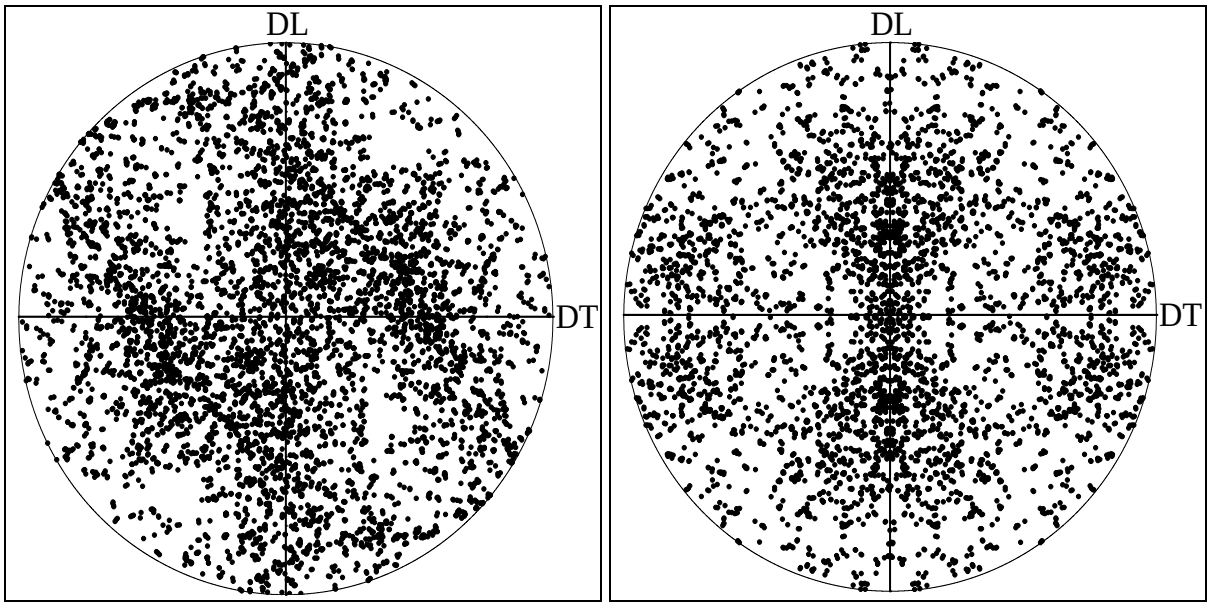


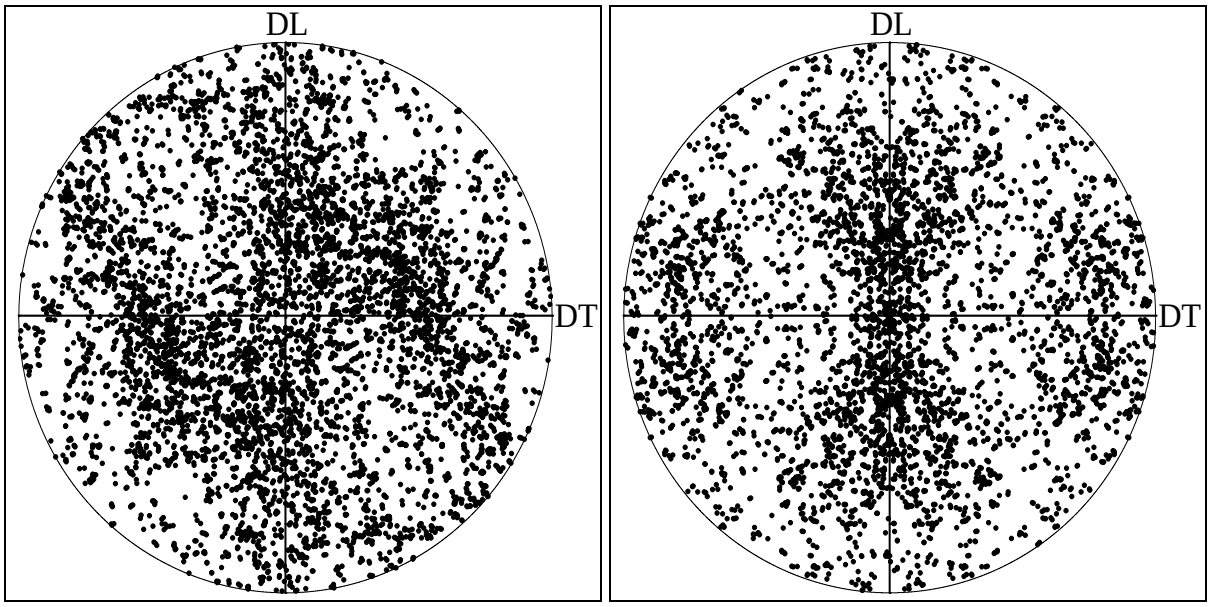
Fig. 2.30. Effet de la direction de chargement (par rapport à la direction de laminage) sur l'évolution du coefficient de Lankford : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

La Fig. 2.31 montre les figures de pôles suivant le plan {111} relatives aux différentes textures cristallographiques obtenues après une déformation $E_{11} = 0{,}12$ en traction uniaxiale dans les directions 45° et 90° par rapport à la direction de laminage. Il faut préciser que le modèle autocohérent est utilisé pour obtenir ces figures. Sur la figure de pôles de la Fig. 2.31(a), relative au polycristal sollicité dans la direction 45° par rapport à la direction de laminage, on distingue deux bandes denses inclinées par rapport à la direction de laminage. Si on compare cette tendance à celle observée sur la figure de pôles relative au polycristal sollicité dans la direction de laminage (voir Fig. 2.6(a)), on peut conclure que l'orientation de 45° appliquée à la texture du polycristal a une influence importante sur la forme de la texture finale obtenue. La Fig. 2.31(b) montre la figure de pôles {111} correspondant au polycristal sollicité dans la direction 90°. On peut remarquer une tendance similaire à celle obtenue pour le polycristal sollicité dans la direction 45°, où les deux bandes denses s'orientent d'un angle de 90° par rapport à la direction de laminage. La Fig. 2.32 montre les mêmes tendances que celles obtenues sur la Fig. 2.31, à la différence près que le modèle de Taylor–Lin est utilisé (à la place du modèle autocohérent). Cependant, les textures déterminées par le modèle de Taylor–Lin sont moins marquées que leurs homologues prédites par le modèle autocohérent.



(a) (b)

Fig. 2.31. Effet de la direction de chargement (par rapport à la direction de laminage) sur les figures de pôles {111} obtenues en utilisant le modèle autocohérent après une déformation en traction uniaxiale $E_{11} = 0{,}12$: (a) polycristal sollicité dans la direction 45° ; (b) polycristal sollicité dans la direction 90°.



(c) (d)

Fig. 2.32. Effet de la direction de chargement (par rapport à la direction de laminage) sur les figures de pôles {111} obtenues en utilisant le modèle de Taylor–Lin après une déformation en traction uniaxiale $E_{11} = 0{,}12$: (a) polycristal sollicité dans la direction 45° ; (b) polycristal sollicité dans la direction 90°.

2.4.6 Sensibilité à la texture morphologique initiale

Dans cette section, nous étudions, sur la base des simulations d'un essai de traction uniaxiale, l'influence de la forme initiale des grains sur le comportement macroscopique du polycristal. Seul le

modèle autocohérent permet une telle étude. En effet, avec le modèle autocohérent, le gradient de vitesse microscopique $\mathbf{g}^{I}$ relatif au grain I dépend implicitement des valeurs des trois demi-axes de l'ellipsoïde qui décrit la morphologie de ce grain. Ce gradient de vitesse microscopique est lié à son homologue macroscopique par la relation de localisation (2.42). Cette relation fait intervenir le tenseur de concentration $\mathbf{A}^{I}$, qui dépend, par la relation (2.43), du tenseur d'interaction $\mathbf{T}^{II}$. Ce dernier dépend explicitement des valeurs des demi-axes du grain comme le montre la relation (2.65). Ainsi, dans le cadre du modèle autocohérent, la forme de chaque grain (décrite par les trois demi-axes de l'ellipsoïde) influence le comportement macroscopique du matériau. Cela n'est pas le cas du modèle de Taylor–Lin, où les gradients de vitesse microscopiques des grains sont égaux au gradient de vitesse macroscopique, et par conséquent sont indépendants de la morphologie des grains. La Fig. 2.33 montre l'influence du ratio des grains (voir la Section 2.3.2 pour plus de détails sur la notion de ratio des grains) sur l'évolution de la contrainte de traction en fonction de la déformation E_{11}. Nous avons utilisé trois ratios différents pour caractériser la forme initiale des grains : le premier ratio vaut (1,1,1) et correspond à des grains sphériques, le second et le troisième ratio sont égaux respectivement à (5,1,1) et à (10,1,1) et correspondent à des grains étirés suivant la direction de laminage. Les différentes propriétés mécaniques relatives au polycristal étudié sont données dans la Section 2.4.1. L'élasticité ainsi que l'écrouissage sont supposés isotropes (avec les paramètres habituels utilisés précédemment). La Fig. 2.33(a) montre une comparaison des différentes courbes contrainte–déformation obtenues en utilisant le modèle autocohérent. On peut remarquer que les courbes contrainte–déformation obtenues avec les ratios (5,1,1) et (10,1,1) sont moins raides que la courbe déterminée avec le ratio (1,1,1). Par ailleurs, l'amplitude des contraintes calculées n'est pas proportionnelle au ratio des demi-axes. En effet, pour une déformation $E_{11} = 0{,}12$, l'écart relatif entre la contrainte correspondant au ratio (1,1,1) et celle du ratio (5,1,1) est égal à $2{,}9\%$. En revanche, l'écart relatif entre la contrainte obtenue avec le ratio (1,1,1) et celle prédite avec le ratio (10,1,1) est égal à $1{,}8\%$. Sur la Fig. 2.33(b), on peut en outre remarquer que les composantes du module tangent restent très peu sensibles au ratio des demi-axes des grains.

La Fig. 2.33(c) illustre l'influence des ratios des demi-axes des grains sur l'anisotropie induite. En effet, on observe des variations assez légères du coefficient de Lankford (en fonction des trois ratios étudiés) comparables à celles observées pour les courbes contrainte–déformation (voir la Fig. 2.33(a)). L'utilisation du ratio (5,1,1) conduit à une augmentation relative du coefficient de Lankford de $1{,}85\%$ par rapport au ratio (1,1,1), tandis que le ratio (10,1,1) entraîne une diminution relative de $1{,}47\%$. Par rapport à l'influence de l'écrouissage anisotrope (étudiée dans la Section 2.4.4) et celle de la texture cristallographique (étudiée dans la Section 2.4.5), nous pouvons conclure que le ratio initial des demi-axes des grains a un impact limité sur les propriétés macroscopiques du matériau.

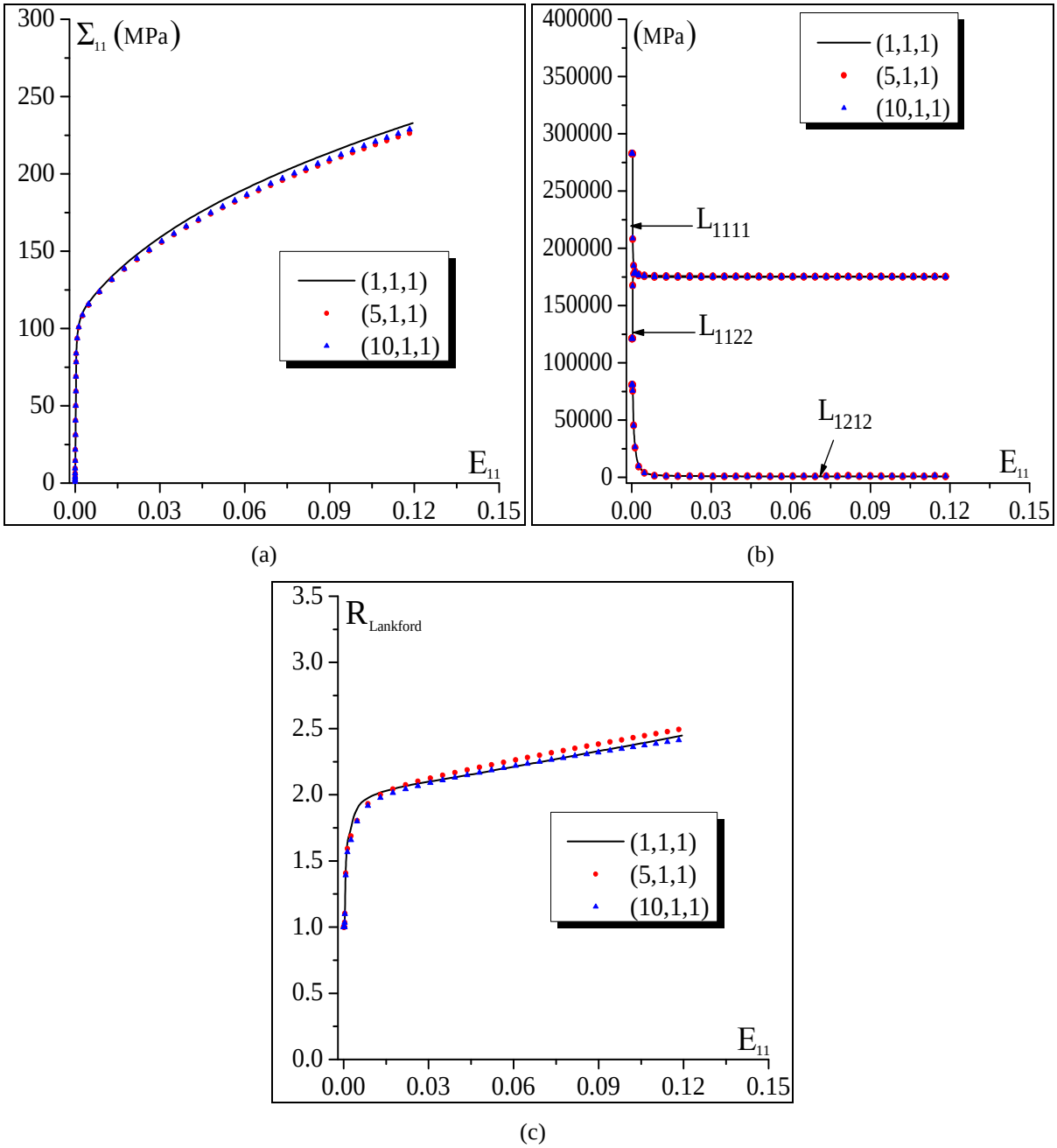
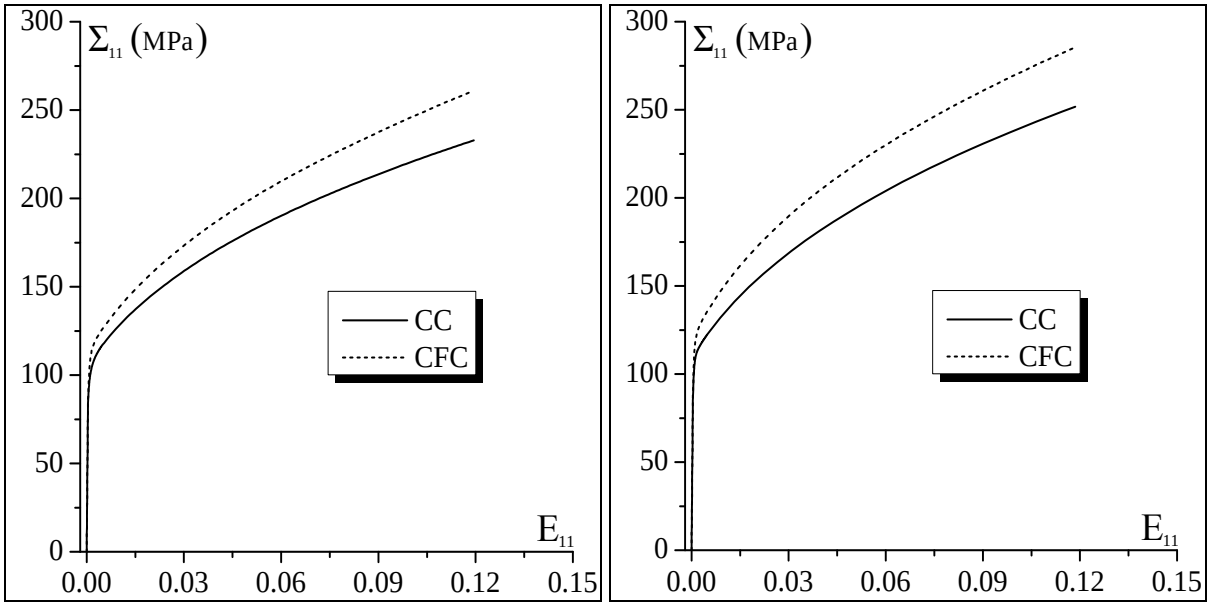


Fig. 2.33. Effet de la morphologie initiale des grains sur l'évolution de quelques variables macroscopiques lors d'un essai de traction uniaxiale : (a) contrainte de traction macroscopique ; (b) composantes du module tangent macroscopique ; (c) coefficient de Lankford ($R_{Lankford}$).

2.4.7 Sensibilité à la structure cristallographique

La structure cristallographique joue un rôle important dans les mécanismes de déformation du matériau à l'échelle locale. En effet, pour un même chargement microscopique $\mathbf{g}^{I}$, différents systèmes de glissement sont activés suivant le fait qu'il s'agisse d'un matériau de type CC ou CFC. Nous rappelons que la liste des différents systèmes de glissement possibles des structures cristallographiques CC et CFC est donnée dans l'Annexe A. Dans cette section, l'influence de la structure

cristallographique sur la réponse macroscopique du polycristal est investiguée en analysant les résultats de la simulation d'un essai de traction uniaxiale. Les paramètres mécaniques utilisés sont ceux donnés dans la Section 2.4.1. L'élasticité ainsi que l'écrouissage sont supposés isotropes. La Fig. 2.34 montre l'effet de la structure cristallographique sur l'évolution de la contrainte macroscopique lors d'un essai de traction uniaxiale. Les tendances obtenues sont peu sensibles au schéma de transition d'échelles utilisé. Dans les deux cas, on peut remarquer que la courbe contrainte–déformation obtenue avec le polycristal à structure CFC est plus raide que celle obtenue avec le polycristal à structure CC (nous rappelons que la structure cristallographique CFC comporte deux fois moins de systèmes de glissement que la structure cristallographique CC). Lipinski (1993) a simulé quelques essais de traction appliqués sur des polycristaux à structure cristallographique CC. Il a considéré deux sous-familles de systèmes de glissement. La première sous-famille comporte 24 systèmes de glissement de direction <111> et de plan {110}. La seconde sous-famille, en plus de contenir tous les systèmes de glissement de la première sous-famille, comporte 24 autres systèmes de glissement de direction <111> et de plan {112}. Il a observé que la courbe de traction correspondant à la première sous-famille était plus raide que celle correspondant à la seconde sous-famille et a conclu que "plus le nombre de systèmes de glissement est important, plus faible est la limite d'écoulement". Dans le cas présent, nous pouvons aboutir à une conclusion similaire. Par ailleurs, en comparant la Fig. 2.34(a) à la Fig. 2.34(b), on peut remarquer que le modèle de Taylor–Lin reste une borne supérieure du modèle autocohérent aussi bien pour la structure cristallographique de type CC que celle de type CFC.



(a) (b)

Fig. 2.34. Effet de la structure cristallographique sur la courbe de traction macroscopique : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

Nous étudions dans la Fig. 2.35 l'impact de la structure cristallographique sur les composantes représentatives du module tangent macroscopique. En comparant les résultats obtenus, nous pouvons affirmer que l'utilisation d'une structure de type CFC à la place d'une structure de type CC n'a d'effet notable que sur la composante de cisaillement du module tangent. En effet, sur la Fig. 2.35(a) où le modèle autocohérent est utilisé, l'écart relatif entre le module de cisaillement L_{1212} lié à la structure CC et celui de la structure CFC est de $17,5\%$ pour une déformation de $E_{11} = 0,12$. Lorsque le modèle de Taylor–Lin est utilisé, cet écart relatif est de 40%. Ces résultats ne sont pas directement perceptibles sur les figures car la valeur de L_{1212} est très faible par rapport à celles des autres composantes. Par ailleurs, il faut préciser qu'avec le modèle autocohérent (à $E_{11} = 0,12$), l'écart relatif déterminé sur la composante L_{1111} (respectivement L_{1122}) est de $4,16\times10^{-6}\,\%$ (respectivement $11,6\times10^{-6}\,\%$). Avec le modèle de Taylor–Lin, on enregistre à $E_{11} = 0,12$ un écart relatif de $14,5\times10^{-6}\,\%$ pour la composante L_{1111} et de $2,28\times10^{-7}\,\%$ pour la composante L_{1122}.

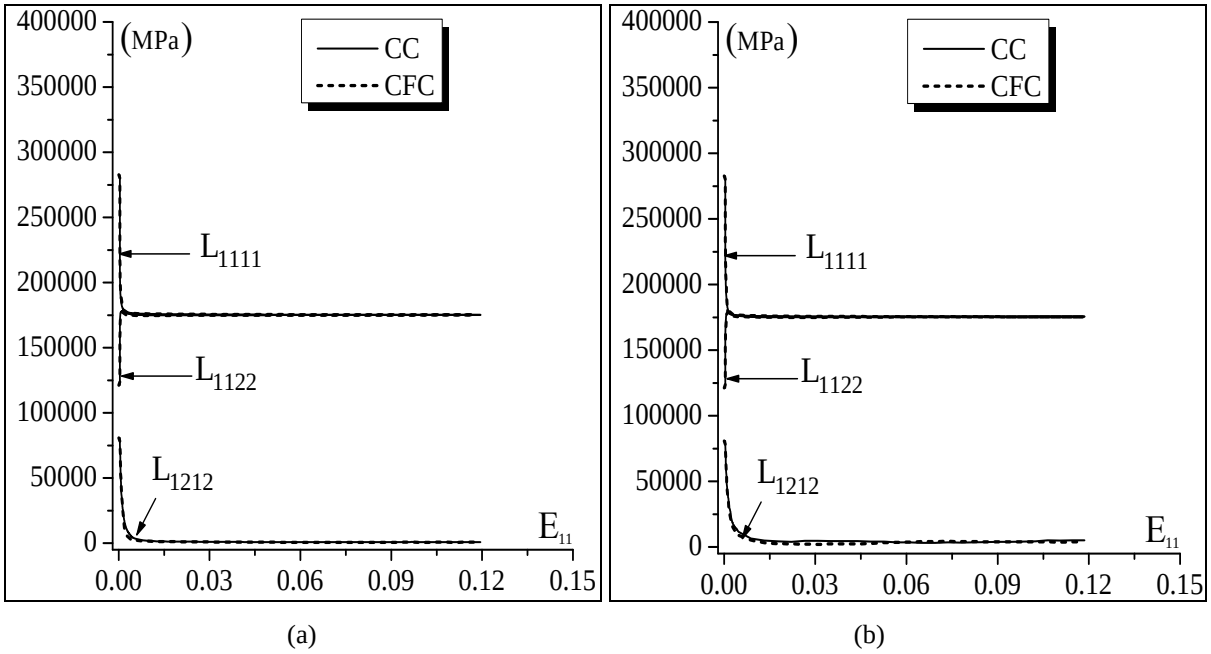
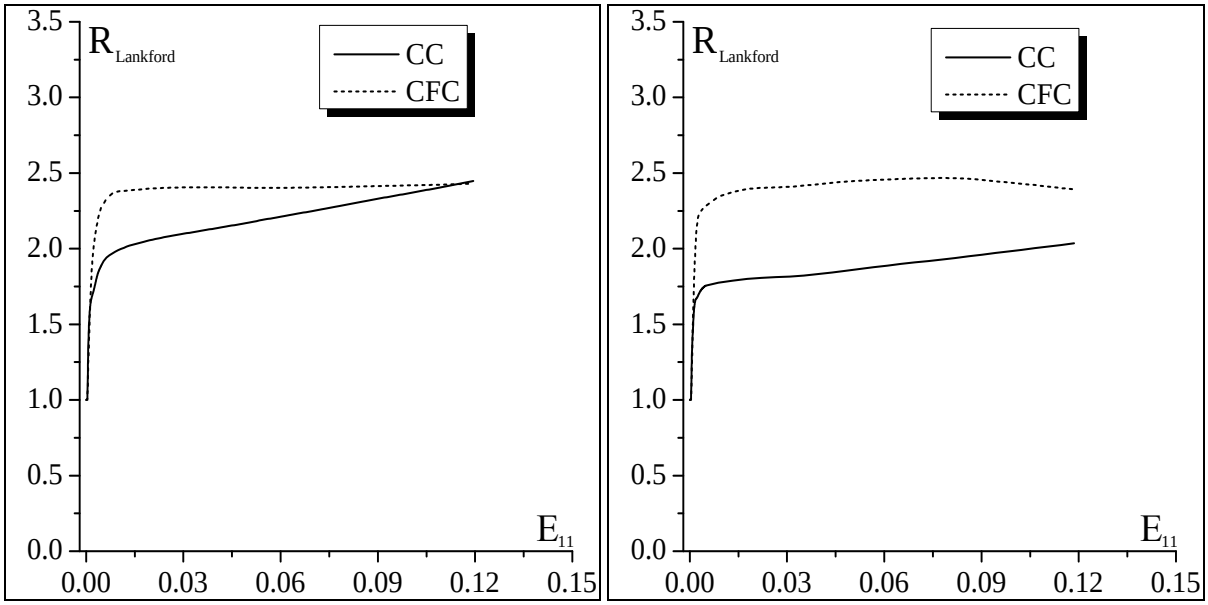


Fig. 2.35. Effet de la structure cristallographique sur les composantes représentatives du module tangent macroscopique lors d'un essai de traction uniaxiale : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

Nous étudions également l'influence de la structure cristallographique sur l'anisotropie induite. Pour cela, nous avons tracé sur la Fig. 2.36 l'évolution du coefficient de Lankford en fonction de E_{11}. Nous pouvons remarquer que, contrairement au cas de la structure cristallographique de type CC, la structure CFC induit un coefficient de Lankford qui est quasiment constant après un certain niveau de déformation (voir la Fig. 2.36(a) où le modèle autocohérent est utilisé) et qui diminue parfois (voir la Fig. 2.36(b) relative au modèle de Taylor–Lin). Nous pensons que cette différence entre les tendances obtenues avec les deux structures cristallographiques est fortement liée à l'évolution de l'activité des

systèmes. Sachant que la déformation des matériaux polycristallins est essentiellement de nature plastique (la déformation élastique étant négligeable), nous émettons l'hypothèse selon laquelle l'ensemble des systèmes actifs de la structure CFC est sujet à des changements beaucoup moins importants que celui de la structure CC. Cela expliquerait la stabilité du coefficient de Lankford dans le cas de la structure CFC. Cette hypothèse reste toutefois à vérifier.



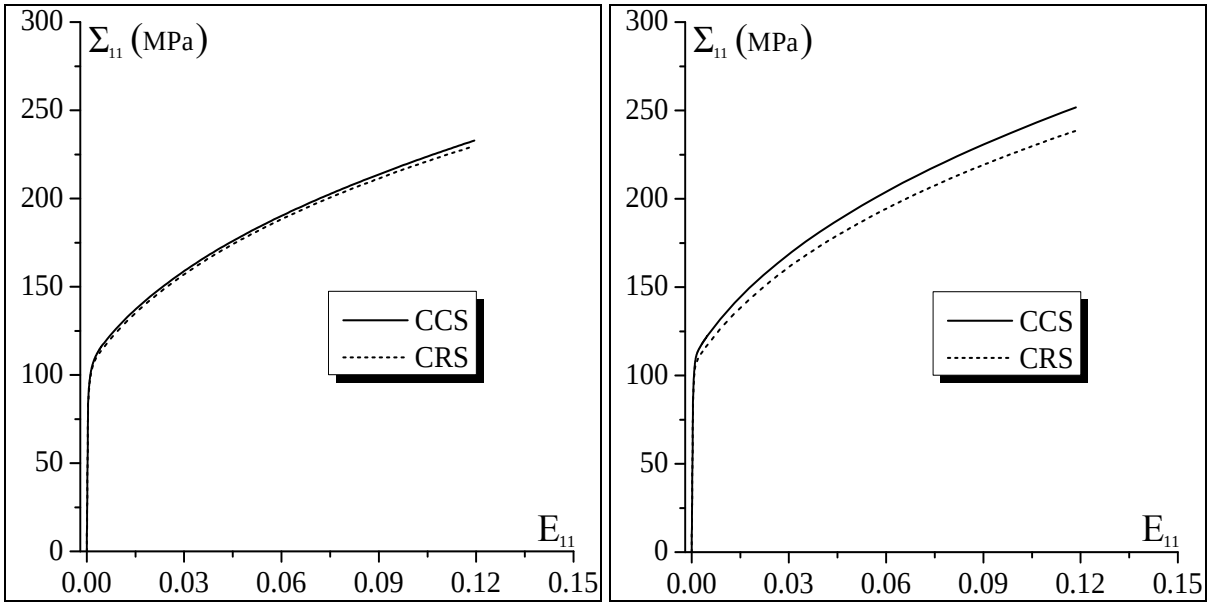
(a) (b)

Fig. 2.36. Effet de la structure cristallographique sur l'évolution du coefficient de Lankford : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

2.4.8 Sensibilité à la loi d'écoulement à l'échelle microscopique

Dans la Section 1.5.2, nous avons étudié l'influence de la loi d'écoulement à l'échelle du monocristal sur le comportement microscopique. Dans ce cadre, nous avons comparé les prédictions obtenues avec le critère classique de Schmid (CCS) et celles obtenues avec la forme régularisée du même critère (CRS). Nous avons observé que l'activité des systèmes de glissement est la même dans les deux cas, mais les valeurs des vitesses de glissement sont différentes. Cette différence est assez faible au début de la déformation mais augmente par la suite. Cela engendre par ailleurs des courbes contrainte–déformation très voisines dans la gamme des petites déformations. Dans cette section, nous menons une étude similaire, mais à l'échelle du polycristal, en simulant un essai de traction uniaxiale appliqué à des polycristaux de structure CC et CFC. Afin de comparer objectivement les prédictions macroscopiques obtenues avec les deux critères, le gradient de vitesse macroscopique $\mathbf{G}$ obtenu en utilisant le critère CCS est enregistré et utilisé comme fichier d'entrée pour effectuer les simulations avec le critère CRS. Par ailleurs, nous précisons que le polycristal étudié est le même que celui qui a été introduit dans la Section 2.4.1 et que le paramètre n qui caractérise l'arrondissement de la surface de charge dans le cas du CRS est fixé à 10. Pour toutes les simulations effectuées dans cette section,

l'élasticité ainsi que l'écrouissage sont supposés isotropes. Pour rappel, les deux coefficients de Lamé λ et μ valent respectivement 121,15 GPa et 80,77GPa (voir la Section 2.4.1), et les 9 paramètres (resp., les 4 paramètres) de la matrice d'anisotropie $\mathbf{a}$ sont fixés à 1 pour la structure CC (resp., CFC). La Fig. 2.37 montre l'effet du choix du critère d'écoulement microscopique sur la courbe de traction macroscopique. Les résultats de cette figure correspondent à la structure cristallographique CC. On peut remarquer qu'avec le modèle autocohérent (voir la Fig. 2.37(a)), la différence entre les prédictions avec le CRS et le CCS est très faible, ce qui confirme le résultat obtenu à l'échelle du monocristal. La tendance est nettement différente en revanche lorsqu'on utilise le modèle de Taylor–Lin. La courbe de traction prédite en utilisant le CRS est beaucoup moins raide que celle obtenue avec le CCS. En plus, la différence entre les deux courbes augmente en fonction de la déformation. Ainsi, à $E_{11} = 0{,}12$, l'écart relatif entre les contraintes est de $5{,}46\%$ contre $1{,}3\%$ avec le modèle autocohérent. Par ailleurs, en comparant les prédictions obtenues avec les deux schémas de transition d'échelles couplés avec le critère CRS, on peut affirmer que le modèle de Taylor–Lin reste une borne supérieure. En effet, à $E_{11} = 0{,}12$ on obtient une contrainte de 229 MPa avec le modèle autocohérent contre 238 MPa avec le modèle de Taylor–Lin.

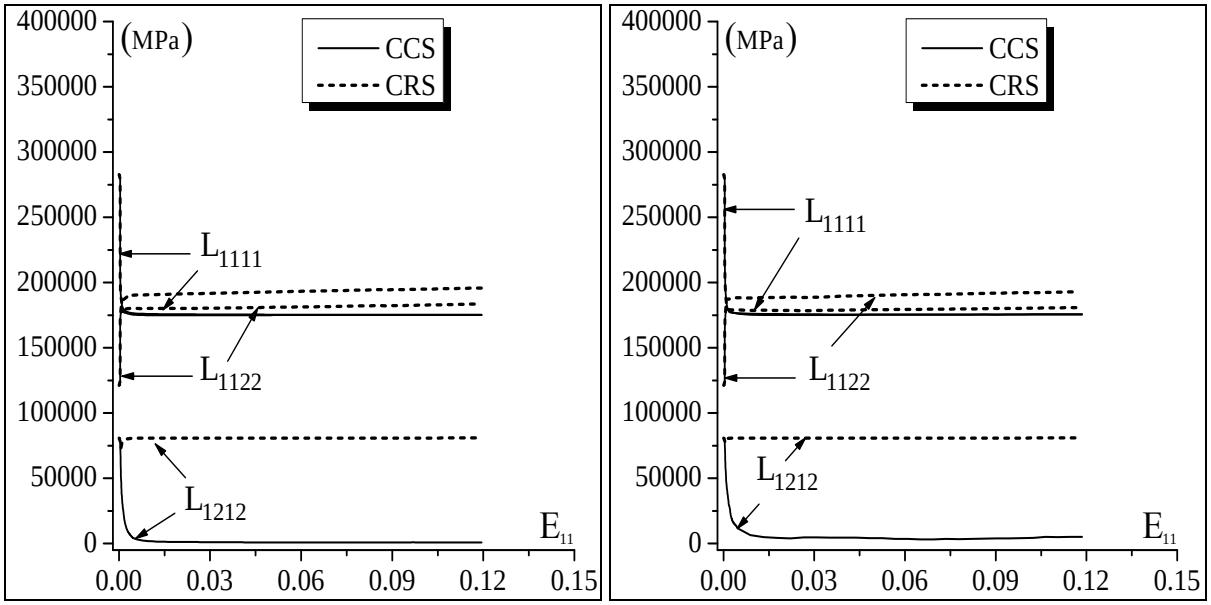


(a) (b)

Fig. 2.37. Effet de la loi d'écoulement microscopique sur la courbe de traction macroscopique (pour une structure cristallographique de type CC) : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

La Fig. 2.38 montre l'évolution des composantes représentatives du module tangent macroscopique suivant les critères CCS et CRS. La structure cristallographique étudiée est de type CC. En comparant les Fig. 2.38(a) et (b), on peut remarquer que le modèle de transition d'échelles utilisé a une influence très limitée sur les tendances obtenues. En effet, au début de la phase élastoplastique, la réduction de la composante L_{1111} est moins élevée dans le cas du CRS que dans le cas du CCS : à $E_{11} = 0{,}12$, la

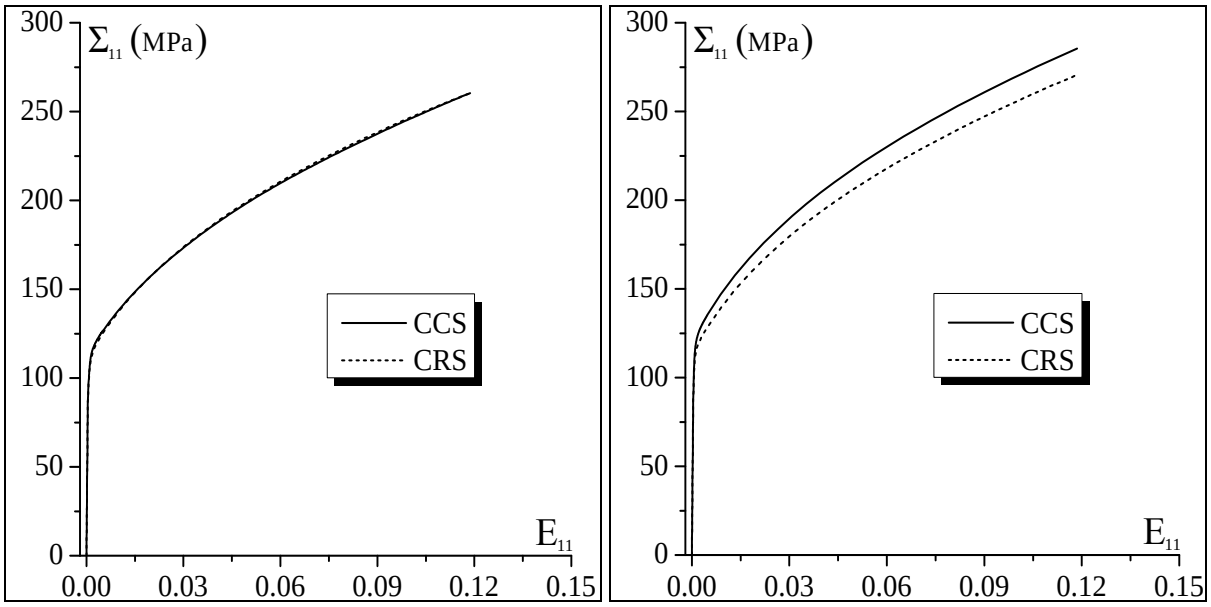
valeur de L_{1111} prédite par le modèle autocohérent couplé avec le critère CRS (resp., CCS) est égale à 183514 MPa (resp., 175256 MPa). Alors que la valeur de la même composante est égale à 180853 MPa (resp., 175433 MPa) lorsque les résultats sont obtenus par le couplage du modèle de Taylor–Lin avec le critère CRS (resp., CCS). L'augmentation de la composante L_{1122} est plus importante dans le cas du CRS que dans celui du CCS (à $E_{11} = 0{,}12$, on note 195744 MPa pour le CRS contre 175173 MPa pour le CCS lorsqu'on utilise le modèle autocohérent, et 192995 MPa pour le CRS contre 175687 MPa pour le CCS lorsqu'on utilise le modèle de Taylor–Lin). La composante L_{1212} subit une réduction significative à l'entrée en plasticité lorsque le CCS est utilisé, alors qu'elle garde sa valeur initiale lorsque la loi d'écoulement est celle du CRS (à $E_{11} = 0{,}12$, on obtient 871 MPa pour le CCS contre 80887 MPa pour le CRS lorsqu'on utilise le modèle autocohérent et 5185 MPa pour le CCS contre 80888 MPa pour le CRS lorsqu'on utilise le modèle de Taylor–Lin). Il faut rappeler que les mêmes tendances ont été obtenues à l'échelle locale (voir la Section 1.5.2).



(a) (b)

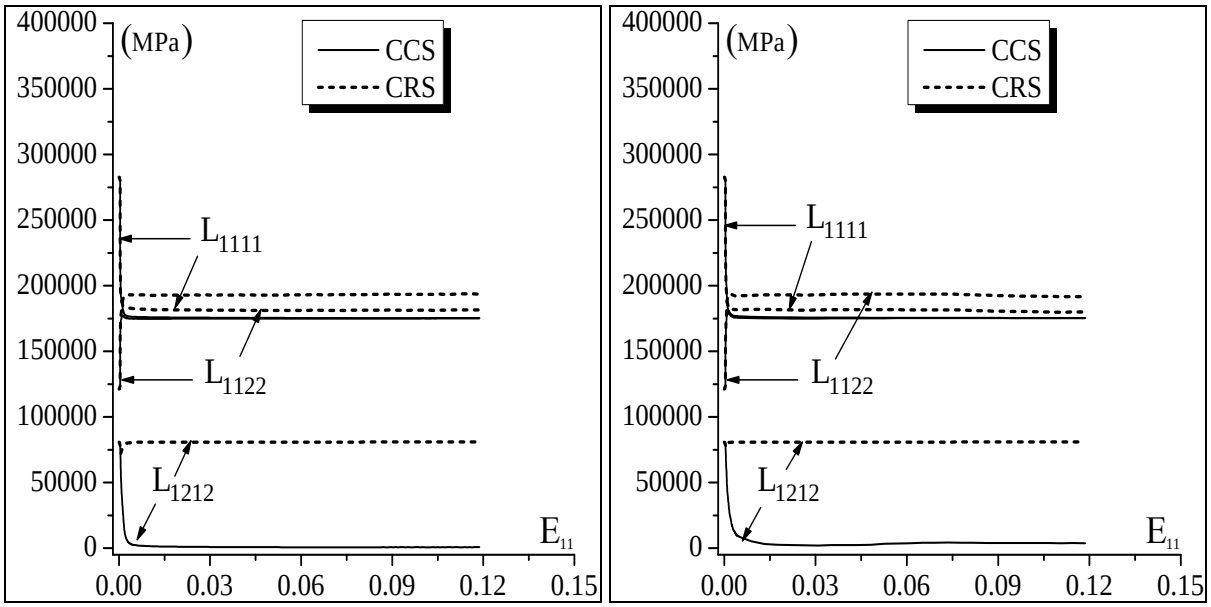
Fig. 2.38. Effet de la loi d'écoulement microscopique sur l'évolution des composantes représentatives du module tangent macroscopique lors d'un essai de traction uniaxiale (pour une structure cristallographique de type CC) : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

L'effet de la loi d'écoulement microscopique sur la réponse macroscopique d'un polycristal à structure cristallographique CFC sollicité en traction uniaxiale est étudié dans les Fig. 2.39 et Fig. 2.40 . En comparant la Fig. 2.39 (resp., Fig. 2.40) à la Fig. 2.37 (resp., Fig. 2.38), on peut remarquer que les conclusions formulées pour le cas de la structure CC sont valables pour la structure CFC.



(a) (b)

Fig. 2.39. Effet de la loi d'écoulement microscopique sur la courbe de traction macroscopique (pour une structure cristallographique de type CFC) : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.



(a) (b)

Fig. 2.40. Effet de la loi d'écoulement microscopique sur l'évolution des composantes représentatives du module tangent macroscopique lors d'un essai de traction uniaxiale (pour une structure cristallographique de type CFC) : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

2.4.9 Performance de la méthode itérative de Newton–Raphson

Dans cette section, nous illustrons la performance de la méthode itérative de type Newton–Raphson que nous utilisons pour résoudre les équations non-linéaires du modèle autocohérent (voir le système d'équations (2.68)). À cet effet, la performance de la méthode du point fixe, qui est classiquement

utilisée pour résoudre des équations relatives au modèle autocohérent, est comparée à celle de la méthode itérative de Newton–Raphson que nous proposons. Cette comparaison est effectuée entre les deux méthodes en termes de nombre d'itérations et de temps de calcul. La Fig. 2.41 montre les résultats obtenus après un essai de traction uniaxiale sur le polycristal défini dans la Section 2.4.1. L'élasticité ainsi que l'écrouissage sont supposés isotropes et la structure cristallographique considérée est de type CC. Nous rappelons que pour imposer les conditions aux limites relatives à l'essai de traction uniaxiale, nous utilisons le logiciel de calcul par éléments finis ABAQUS où le modèle autocohérent a été implanté sous la forme d'une subroutine UMAT. Il est évident que la vitesse de convergence du modèle autocohérent influence celle du calcul par éléments finis et réciproquement. Afin de supprimer l'influence du calcul par éléments finis et de ne comparer que les itérations relatives au modèle autocohérent, le gradient de vitesse macroscopique $\mathbf{G}$ obtenu par le calcul par éléments finis à la convergence de chaque incrément de calcul est stocké dans un fichier. Ces données stockées (en termes de gradient de vitesse macroscopique) sont ensuite utilisées comme variables d'entrées d'un code maison du modèle autocohérent. Les chargements utilisés pour comparer la performance de la méthode du point fixe à celle de la méthode de Newton–Raphson sont donc exactement les mêmes. La Fig. 2.41(a) montre l'évolution du nombre d'itérations (NI) nécessaires pour la convergence sur chaque incrément, en fonction de la déformation longitudinale E_{11} pour un pas de temps de $5\times10^{-5}\mathrm{s}$. Le symbole "*" indique le niveau de déformation atteint à la divergence du calcul. On peut remarquer que la méthode de Newton–Raphson requiert nettement moins d'itérations que celle du point fixe. En effet, sur tout le calcul, le nombre d'itérations à chaque incrément ne dépasse pas 12 lorsqu'on utilise la méthode de Newton–Raphson et le nombre moyen d'itérations est de 4,72. En revanche, lorsqu'on utilise la méthode du point fixe, le nombre d'itérations augmente en fonction de la déformation et le calcul fini par diverger à $E_{11}=0{,}117$. On obtient pour ce cas un nombre d'itérations moyen de 15,25. Lorsqu'on multiplie le pas de temps par 2 ($10^{-4}\mathrm{s}$ au lieu de $5\times10^{-5}\mathrm{s}$), on observe une tendance similaire à celle observée avec le pas de temps $5\times10^{-5}\mathrm{s}$, comme c'est illustré sur la Fig. 2.41(b) avec cette fois-ci une divergence plus précoce de la méthode du point fixe ($E_{11}=0{,}108$). On peut par ailleurs remarquer que pour les deux méthodes itératives, la valeur de NI est plus élevée avec un pas de temps de $10^{-4}\mathrm{s}$ qu'avec un pas de temps de $5\times10^{-5}\mathrm{s}$. En effet, le nombre moyen d'itérations est de 5,54 lorsqu'on utilise la méthode de Newton–Raphson, et de 15,8 lorsqu'on utilise celle du point fixe. Sur la Fig. 2.41(c), où le pas de temps imposé est de $5\times10^{-4}\mathrm{s}$, on peut observer que les tendances notées sur les figures précédentes (Fig. 2.41(a) et Fig. 2.41(b)) se confirment. En effet, avec la méthode de Newton–Raphson, le nombre d'itérations par incrément reste inférieur à 12 et sa valeur moyenne passe cette fois-ci à 8,08. Avec la méthode du point fixe, la valeur moyenne est de 18, et la divergence du calcul itératif intervient à $E_{11}=0{,}106$.

L'étude précédente illustre clairement la performance de la méthode de Newton–Raphson par rapport à celle du point fixe dans la résolution des équations du schéma autocohérent.

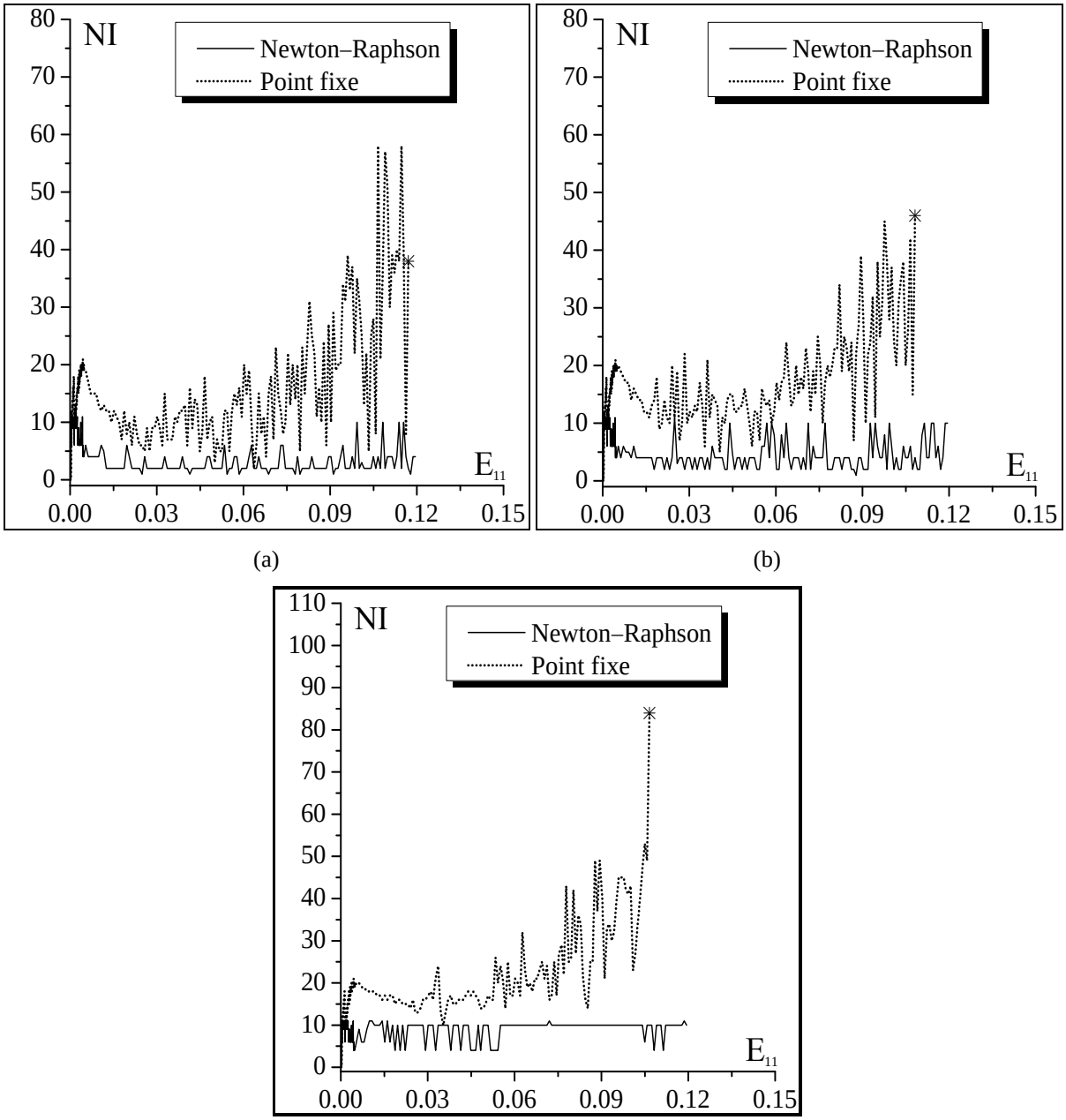


Fig. 2.41. Comparaison du nombre d'itérations (NI) nécessaires à la convergence du modèle autocohérent suivant les méthodes de Newton–Raphson et du point fixe : (a) pas de temps de 5×10^{-5}s ; (b) pas de temps de 10^{-4}s ; (c) pas de temps de 5×10^{-4}s.

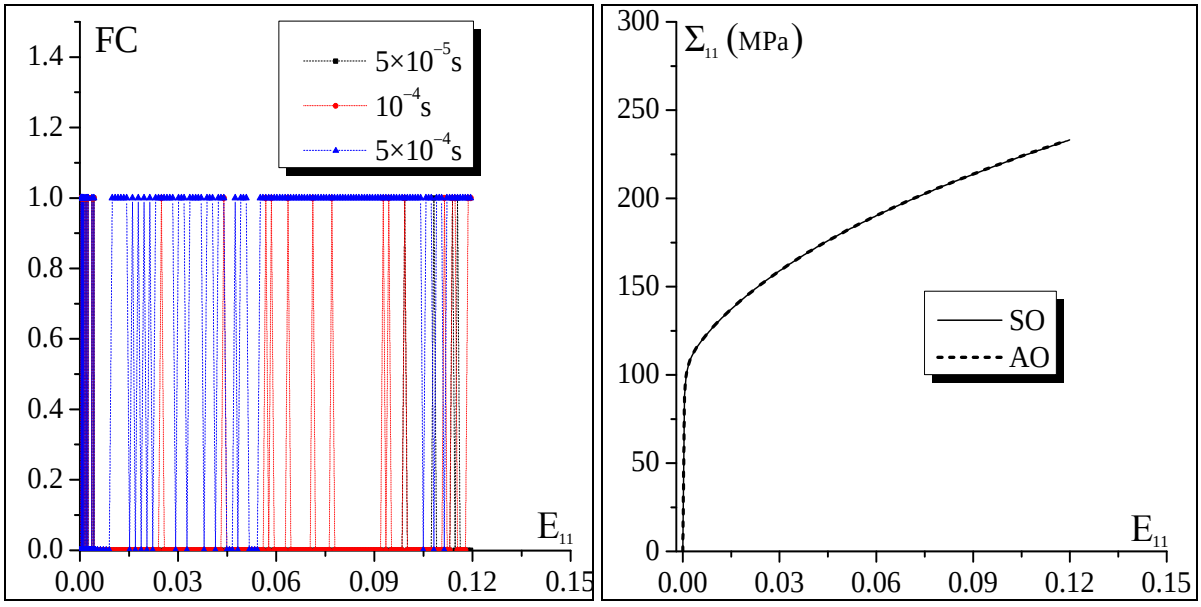
Dans le paragraphe précédent, il a été démontré que la méthode itérative de Newton–Raphson que nous proposons augmente sensiblement la robustesse de la résolution numérique des équations du modèle autocohérent. Cependant, la mise en place de cette méthode peut s'avérer coûteuse en temps de calcul. En effet, le calcul de la matrice jacobienne du système des équations non-linéaires du

modèle autocohérent (voir la relation (2.88)) nécessite des opérations arithmétiques importantes (sur des tenseurs de dimension 9×9×9×9) qui sont multiples du nombre de grains constituant le polycristal. Cela engendre des temps de calcul prohibitifs. Des solutions d'optimisation du modèle ont alors été envisagées. Dans ce paragraphe, nous détaillons quelques-unes de ces propositions.

- La première amélioration concerne la fréquence de calcul de la matrice jacobienne. En effet, cette dernière ne doit pas être forcément déterminée systématiquement à toutes les itérations de calcul. Pour cela, nous avons choisi de la calculer une fois toutes les 10 itérations. Au vu des différentes simulations effectuées, nous avons remarqué qu'il est très courant qu'une même valeur (de la matrice jacobienne calculée) permette la convergence sur plusieurs incréments. La Fig. 2.42(a) montre l'évolution de la fréquence de calcul de la matrice jacobienne en fonction de la déformation E_{11} suivant différents pas de temps imposés ($5\times10^{-5}\,\mathrm{s}$, $10^{-4}\,\mathrm{s}$ et $5\times10^{-4}\,\mathrm{s}$). On peut remarquer que pour les trois pas de temps, la matrice jacobienne n'est pas calculée plus d'une fois par incrément de calcul. En revanche, la valeur moyenne de cette fréquence de calcul augmente avec le pas de temps imposé. Ainsi, pour un pas de temps de $5\times10^{-5}\,\mathrm{s}$, cette valeur est de 0,08. Elle est égale à 0,12 lorsque le pas de temps vaut $10^{-4}\,\mathrm{s}$. Enfin, elle est égale à 0,51 lorsque le pas de temps est de $5\times10^{-4}\,\mathrm{s}$.
- La seconde amélioration consiste à n'intégrer les relations constitutives des différents grains du polycristal qu'une seule fois par incrément et à n'utiliser qu'un seul tenseur d'interaction $\mathbf{T}^0$ pour tous les grains I. En effet, le modèle autocohérent, tel qu'il a été décrit dans la Section 2.3.2, est une combinaison de la méthode itérative du point fixe (qui constitue une couche supérieure) et de celle de Newton–Raphson (qui est imbriquée dans la méthode du point fixe). La première approche itérative est utilisée pour calculer, pour tous les grains I, les gradients de vitesse $\mathbf{g}^{\mathrm{I}}$, les modules tangents microscopiques $\mathbf{l}^{\mathrm{I}}$ obtenus après intégration des relations constitutives à l'échelle locale, et enfin les tenseurs d'interactions $\mathbf{T}^{\mathrm{II}}$ (voir l'Étape 2 de la Section 2.3.2). La seconde est utilisée pour calculer le module tangent macroscopique $\mathbf{L}$ et les différents tenseurs de concentration $\mathbf{A}^{\mathrm{I}}$ des grains. Pour réduire substantiellement les temps de calcul, nous proposons de supprimer la couche supérieure (caractérisée par la méthode du point fixe). Ainsi les gradients de vitesse microscopiques ne sont calculés qu'une seule fois en utilisant les tenseurs de concentration déterminés à la convergence du modèle autocohérent sur le pas de temps précédent. De même, nous supposons (de manière approximative) que malgré leurs diverses orientations cristallographiques, tous les grains interagissent de la même façon avec le milieu effectif. Les tenseurs d'interaction $\mathbf{T}^{\mathrm{II}}$ des différents grains sont donc remplacés par un tenseur unique $\mathbf{T}^0$ représentant l'interaction entre un "grain moyen" et le milieu de référence. Les demi-axes et le tenseur d'orientation des directions de déformation principales de ce "grain moyen" sont déterminés par le gradient de transformation macroscopique. Le calcul du tenseur d'interaction requiert d'importantes

opérations arithmétiques et la présente simplification permet de réduire sensiblement les temps de calcul, d'autant plus que le nombre de grains constituant le polycristal est élevé.

Des deux solutions d'optimisation présentées dans les paragraphes précédents, c'est surtout la deuxième qui est susceptible d'influencer la précision des résultats obtenus. Pour évaluer l'influence des simplifications adoptées, nous comparons les réponses contrainte–déformation du polycristal (en maintenant l'essai de traction uniaxiale) simulées avec, d'une part le modèle autocohérent initial, et d'autre part le modèle optimisé. La Fig. 2.42(b) montre les résultats obtenus. On remarque dans ce cas précis que les hypothèses de simplification adoptées n'ont aucune influence sur la réponse macroscopique du matériau. Néanmoins, dans la Section 2.4.10, il sera montré qu'à l'échelle d'une structure, de légères différences peuvent être observées. Par ailleurs, la forme optimisée du modèle autocohérent semble être particulièrement adaptée à des applications industrielles où le gain en temps de calcul est un véritable enjeu. En effet, la simulation effectuée avec le modèle standard dure 28730 s sur un cluster de 15 processeurs de 64 bits avec 2,4 GHz de fréquence chacun, et une mémoire (RAM) totale de 32 Go. Lorsqu'on utilise le modèle optimisé, la même simulation ne dure que 2222 s. Par conséquent, le modèle optimisé est 12,9 fois plus rapide que le modèle classique (non optimisé).



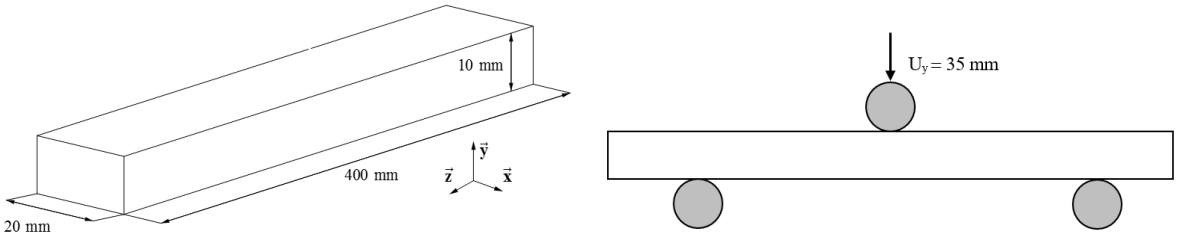
(a) (b)

Fig. 2.42. Optimisation du modèle autocohérent : (a) fréquence de calcul (FC) de la matrice jacobienne du système d'équations non-linéaires du modèle autocohérent ; (b) réponse contrainte–déformation prédite par le modèle autocohérent avec (AO) ou sans (SO) optimisation.

2.4.10 Application des modèles multi-échelles au calcul de structure

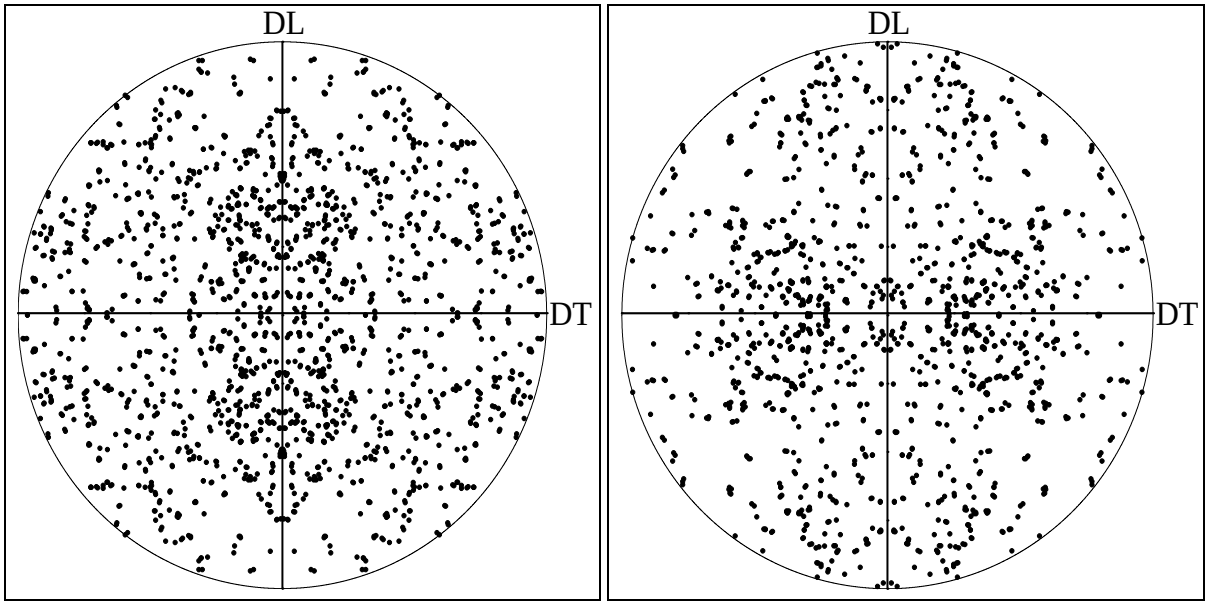
Dans les sections précédentes, l'application des deux modèles micromécaniques présentés (en l'occurrence le modèle autocohérent et celui de Taylor–Lin) a été restreinte à des simulations d'essais rhéologiques de type traction uniaxiale et cisaillement simple. Dans cette section, nous utilisons ces

modèles micromécaniques dans le cadre du calcul de structures par éléments finis. Dans ce sens, nous avons simulé un essai de flexion 3 points appliqué à une poutre métallique de 400 mm de longueur, 20 mm de largeur et 10 mm d'épaisseur (Fig. 2.43(a)). Les simulations numériques ont été effectuées à déplacement imposé, en modélisant chaque appui par le contact de la poutre sur un plot cylindrique indéformable (Fig. 2.43(b)). Les plots des extrémités gauche et droite sont encastrés, tandis que le plot central (au milieu de la poutre) est supposé mobile dans la direction $\vec{\mathbf{y}}$. Le déplacement de ce plot représente le chargement appliqué à la poutre. La flexion induite atteint une flèche de 35 mm au centre de la face supérieure de la poutre. Pour mettre en évidence la présence de contraintes résiduelles dans la poutre, l'essai de flexion est suivi d'une décharge élastique. Dû à la symétrie du chargement suivant les plans ($\vec{\mathbf{x}}$-$\vec{\mathbf{y}}$) et ($\vec{\mathbf{y}}$-$\vec{\mathbf{z}}$), nous réduisons le domaine d'étude au quart de la structure. Cette simplification, bien que discutable au vu du caractère anisotrope de la loi de comportement du matériau, est privilégiée dans un souci de réduction du temps de calcul. Ainsi un maillage de 225 éléments de type C3D8R est appliqué à raison de 25 éléments suivant la longueur, 3 éléments suivant la largeur et 3 éléments suivant l'épaisseur. À chaque point d'intégration de la structure, nous associons un polycristal composé de 500 grains de type CC. La texture cristallographique initiale est supposée être la même pour tous les points d'intégration. Cette texture cristallographique est définie par les figures de pole données dans les Fig. 2.44. L'élément fini à intégration réduite de type C3D8R a été choisi pour des raisons d'optimisation du temps de calcul. En effet, cet élément ne comporte qu'un seul point d'intégration. Pour toutes les simulations effectuées dans cette section, l'élasticité ainsi que l'écrouissage sont supposés isotropes. Les paramètres d'élasticité et d'écrouissage considérés sont les mêmes que ceux donnés dans les sections précédentes (Sections 2.4.2, 2.4.3, 2.4.4, 2.4.5, 2.4.6, 2.4.7).



(a) (b)

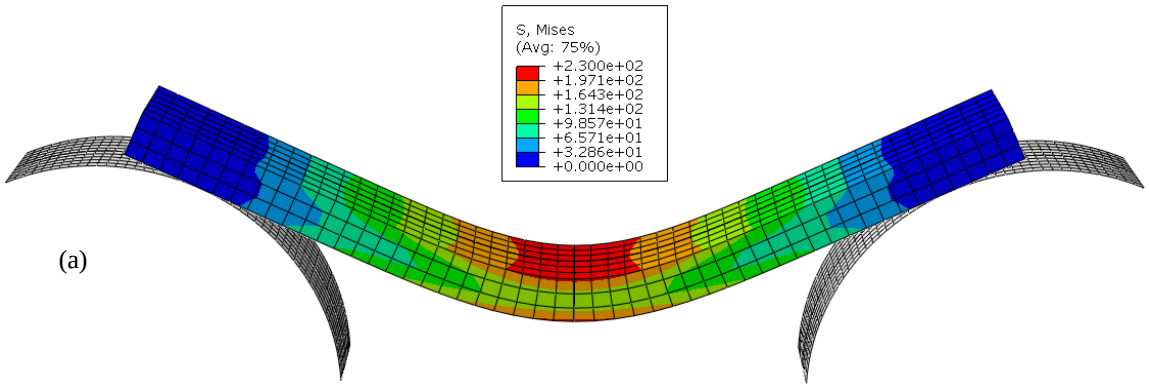
Fig. 2.43. Essai de flexion à 3 points : (a) Dimensions de la poutre ; (b) Conditions aux limites adoptées.



(a) (b)

Fig. 2.44. Texture cristallographique initiale du polycristal : (a) figure de pôles {111} ; (b) figure de pôles {110}.

La Fig. 2.45 montre la distribution des contraintes équivalentes au sens de von Mises dans la poutre à la fin du chargement (lorsque U_y est égal à 35 mm). Comme l'on pourrait s'y attendre, on note une forte concentration de la contrainte dans la zone centrale de la poutre. Les éléments subissant les sollicitations les plus fortes sont ceux des faces supérieure (qui sont en état de compression) et inferieure (qui sont en état de traction). Les éléments qui se trouvent entre ceux situés dans les faces supérieure et inférieure de la poutre subissent en revanche des sollicitations modérées. Il faut également remarquer qu'avec les deux modèles de transition d'échelles, la distribution des contraintes équivalentes dans la poutre est pratiquement la même.



(a)

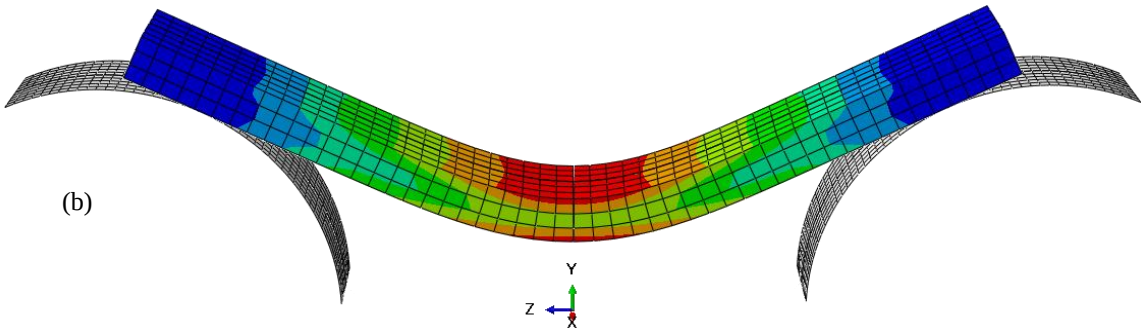
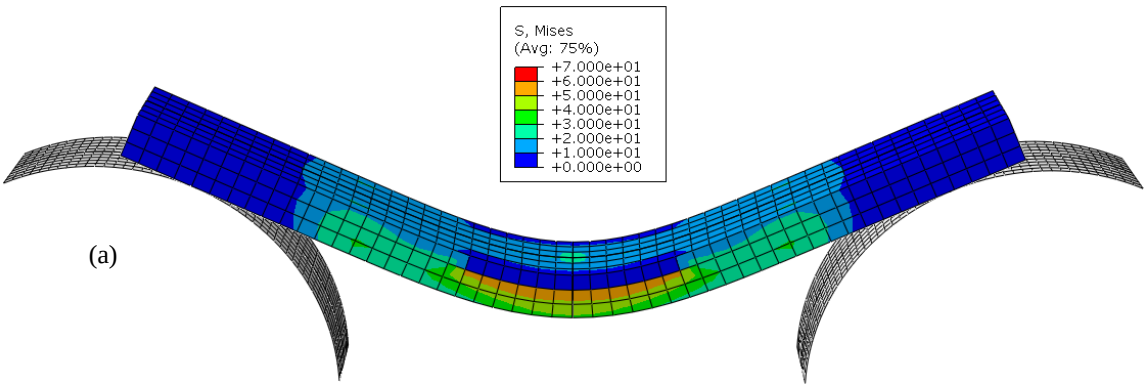


Fig. 2.45. Distribution des contraintes équivalentes de von Mises dans la poutre à la fin du chargement : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor–Lin.

À présent, nous présentons sur la Fig. 2.46 la distribution des contraintes résiduelles d'ordre 1. Ce sont les contraintes macroscopiques dans la poutre après décharge élastique. Cette fois-ci, le modèle de transition d'échelles a une forte influence sur la distribution de ces contraintes, surtout dans la zone centrale de la poutre. En effet, avec le modèle autocohérent, on obtient une répartition plus homogène. Il faut préciser que les contraintes résiduelles d'ordre 1 ne sont que les moyennes volumiques des contraintes microscopiques (encore désignées sous l'appellation de contraintes résiduelles d'ordre 2). Dans la Section 2.4.1, où un essai de traction uniaxiale a été simulé sur un polycristal défini par une texture orthotrope de 2000 grains, il a été observé que la répartition des contraintes microscopiques est uniforme lorsqu'on utilise le modèle autocohérent. Cela n'est pas le cas du modèle de Taylor–Lin, où le nombre de grains qui ont une contrainte résiduelle positive est plus élevé que le nombre de grains qui ont une contrainte résiduelle négative. Ainsi le modèle autocohérent, qui est basé sur une hypothèse d'hétérogénéité de la déformation à l'échelle locale (en raison du respect de la relation d'équilibre) entraine une réponse macroscopique homogène (Fig. 2.46(a)), tandis que le modèle de Taylor–Lin qui repose sur l'hypothèse d'homogénéité de la déformation à l'échelle locale entraine une réponse macroscopique moins homogène (voir Fig. 2.46(b)).



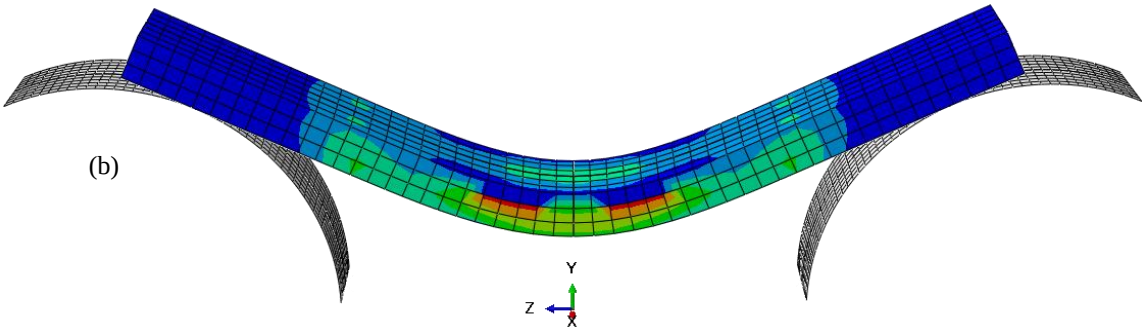


Fig. 2.46. Distribution des contraintes résiduelles d'ordre 1 : (a) modèle autocohérent ; (b) modèle de Taylor-Lin.

La Fig. 2.47 montre l'évolution de la contrainte équivalente de von Mises de trois éléments finis, en fonction de la déformation logarithmique longitudinale E_{33}. Ces trois éléments sont situés au centre de la poutre suivant l'axe $\vec{y}$ correspondant à la direction de l'épaisseur. Le premier et le troisième élément se trouvent respectivement sur les faces supérieure et inférieure et sont désignés par les termes "Élément 1" et "Éléments 3". Le second élément se trouve entre les deux éléments précédents et est désigné par le terme "Élément 2". Sur les Fig. 2.47(a) et Fig. 2.47(c) correspondant respectivement à l'Élément 1 et à l'Élément 3, on peut remarquer que les évolutions de la contrainte de von Mises sont tout à fait similaires, mêmes si ces deux éléments subissent des sollicitations inverses (l'Élément 1 subit une compression, et l'Élément 3 une traction). En effet, pour une flèche de 35 mm imposée au centre de la poutre, on obtient dans l'Élément 1 une contrainte équivalente de 207 MPa pour une déformation $E_{33} = 0,06$ lorsque le modèle autocohérent est utilisé. Avec le modèle de Taylor–Lin, la contrainte équivalente vaut 218 MPa et la déformation E_{33} reste égale à 0,06. Il s'ensuit une décharge élastique où la contrainte (resp. la flèche) se stabilise à 6,7 MPa (resp. 34,11 mm) avec le modèle autocohérent, et 7,33 MPa (resp. 34,07 mm) avec le modèle de Taylor–Lin. Les valeurs de 6,7 MPa et 7,33 MPa représentent la contrainte résiduelle d'ordre 1. Dans l'Élément 3, la contrainte équivalente déterminée par le modèle autocohérent est de 205 MPa et correspond à une déformation de $E_{33} = 0,07$. Dans le cas du modèle de Taylor–Lin, cette limite vaut 219 MPa et correspond à une déformation de $E_{33} = 0,06$. Après la décharge élastique, on note une valeur de 38,3 MPa lorsque le modèle autocohérent est utilisé, et 35,6 MPa lorsque le modèle de transition d'échelle est celui de Taylor–Lin. Dans l'Élément 2 (voir la Fig. 2.47(b)), on peut noter que la contrainte équivalente est beaucoup plus faible que celles des éléments correspondant aux faces supérieure (Élément 1) et inférieure (Élément 3) de la poutre. En effet, elle vaut 97,7 MPa lorsqu'on utilise le modèle autocohérent, et 105,26 MPa lorsqu'on utilise le modèle de Taylor–Lin. Les valeurs des contraintes obtenues après décharge élastique sont en revanche plus élevées que celles des Éléments 1 et 3. On obtient en effet 56,8 MPa avec le modèle autocohérent et 62,39 MPa avec le modèle de Taylor–Lin.

En observant les trois figures (Fig. 2.47(a), Fig. 2.47(b) et Fig. 2.47(c)), on peut par ailleurs remarquer que le modèle de Taylor–Lin reste une borne supérieure au modèle autocohérent.

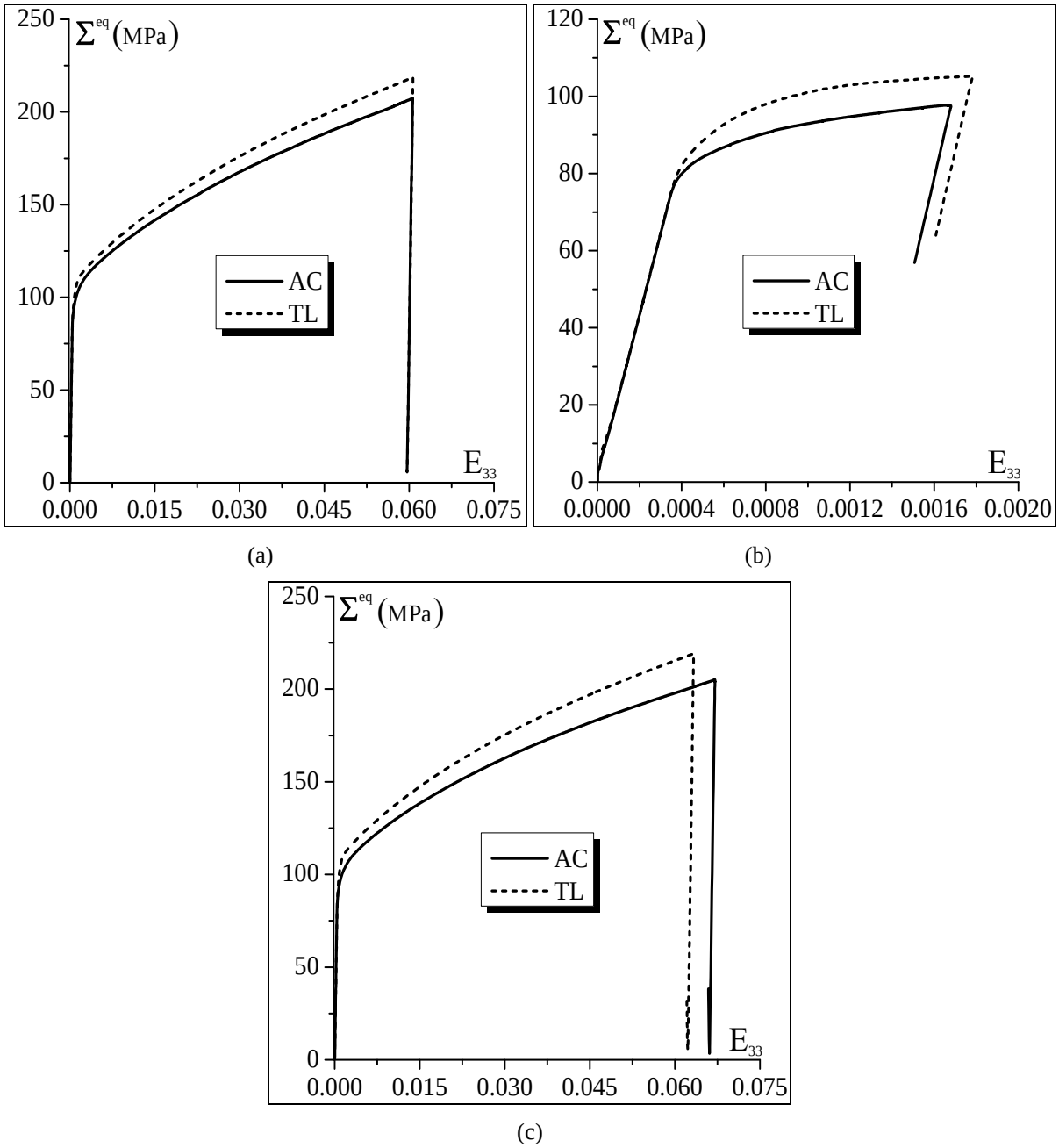
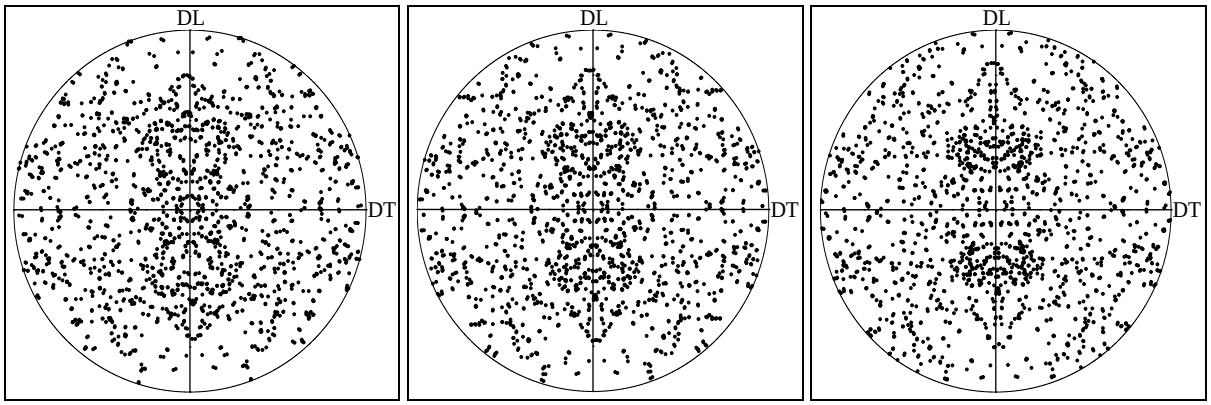


Fig. 2.47. Réponse contrainte–déformation obtenue en appliquant les modèles autocohérent (AC) et Taylor–Lin (TL) : (a) Élément 1 ; (b) Élément 2 ; (c) Élément 3.

Un des nombreux avantages des modèles multi-échelles est sans doute la possibilité d'obtenir des informations précieuses sur la structure interne du matériau, comme l'évolution de sa texture cristallographique. Une telle prédiction n'est pas possible lorsque le calcul de structure est effectué en utilisant des modèles de comportement de type phénoménologique. Les Fig. 2.48(a), Fig. 2.48(b) et Fig. 2.48(c) montrent les figures de pôles {111} correspondant respectivement à l'Élément 1, l'Élément 2 et l'Élément 3, obtenues après décharge élastique. Seuls les résultats du modèle

autocohérent sont fournis sur cette figure ; sachant que le modèle de Taylor–Lin permet d'obtenir des prédictions assez similaires à celles obtenues avec le modèle autocohérent en raison des faibles niveaux de déformation atteints dans la structure (pas plus de 7% de déformation logarithmique longitudinale). Nous pouvons clairement observer une distinction entre les textures cristallographiques relatives aux différents éléments sélectionnés suivant la position de ces derniers. Ainsi, pour l'Élément 1 et l'Élément 3 qui se trouvent respectivement sur les faces supérieure et inférieure de la poutre, et qui subissent des sollicitations assez fortes, les textures correspondantes sont nettement différentes de la texture initiale du polycristal. En revanche, la texture cristallographique relative à l'Élément 2 évolue très peu en raison du faible niveau de déformation atteint. En effet, sur la Fig. 2.47, on peut remarquer que la déformation E_{33} de l'Élément 2, la déformation E_{33} n'excède pas 0,002, alors qu'elle atteint une valeur de 0,06 dans l'Élément 1 et l'Élément 3.



(a) (b) (c)

Fig. 2.48. Figures de pôles {111} obtenues avec le modèle autocohérent : (a) Élément 1 ; (b) Élément 2 ; (c) Élément 3.

Dans la Section 2.4.9, des pistes d'amélioration du modèle autocohérent, sur le plan de sa mise en œuvre numérique et de l'efficacité des algorithmes associés, ont été explorées. Parmi les solutions proposées, certaines sont susceptibles d'influencer la précision des résultats obtenus. C'est le cas du calcul d'un tenseur d'interaction $\mathbf{T}^0$ unique et commun à tous les grains. Il a été démontré (Fig. 2.42(b)) que cette simplification avait très peu d'impact sur la précision du calcul lors de la simulation d'un essai de traction uniaxiale impliquant un seul élément fini. Nous menons une étude similaire sur le calcul de structure effectué dans le cas présent, en considérant comme échantillons d'étude l'Élément 1 et l'Élément 3. Les Fig. 2.49(a) et Fig. 2.49(b) montrent les évolutions de la contrainte équivalente de von Mises en fonction de E_{33} obtenues en utilisant le modèle autocohérent initial et sa version optimisée. Le symbole "*" indique les niveaux de contrainte et de déformation atteints lors de la divergence du calcul. On peut remarquer qu'à partir d'un certain niveau de déformation, l'écart entre les contraintes commence à être plus nettement visible. Cet écart reste toutefois assez faible. Le

résultat confirme la pertinence du choix d'optimisation adopté pour améliorer la convergence des algorithmes de résolution numérique du modèle autocohérent.

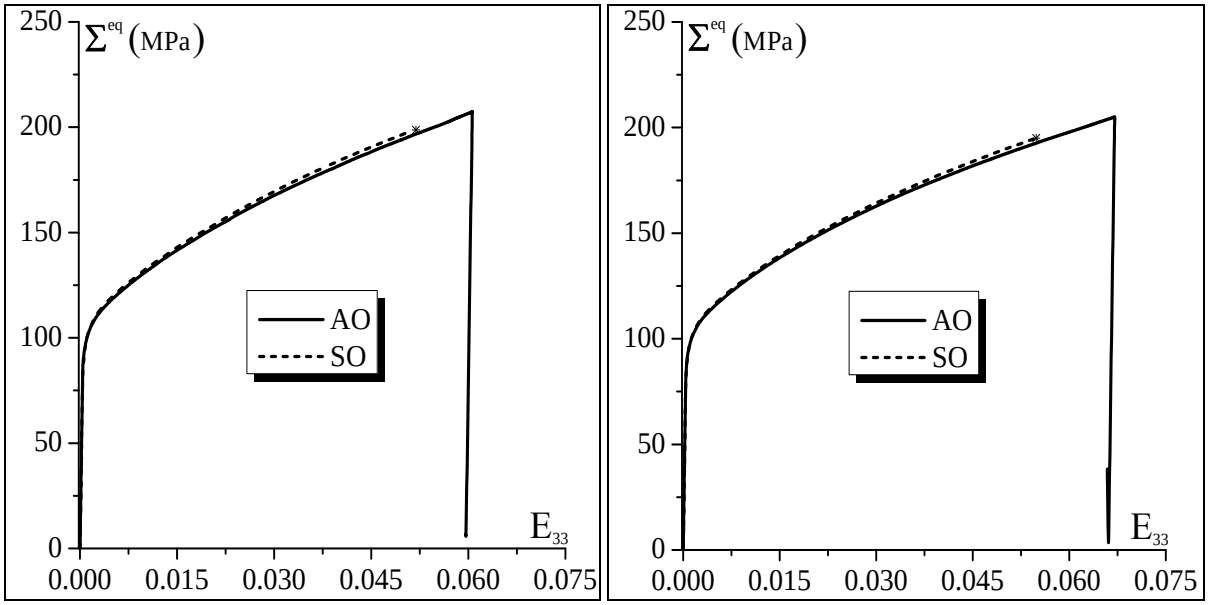


Fig. 2.49. Réponse contrainte-déformation prédite par le modèle autocohérent avec (AO) ou sans (SO) optimisation : (a) Élément 1 ; (b) Élément 3.

2.4.11 Influence du module tangent cohérent

Nous avons présenté dans la Section 1.3.3, les développements numériques nécessaires pour calculer le module tangent cohérent à l'échelle du monocristal. À l'échelle du polycristal, le module tangent cohérent se déduit des modules tangents cohérents microscopiques par une relation de moyenne. En effet, une combinaison des relations (1.110) et (2.42) permet d'écrire :

$$\forall I = 1,...,N_g \quad ; \quad \mathcal{D}\left(\Delta\boldsymbol{\sigma}^I\right) = \mathbf{c}_c^{ep\,I} : \mathbf{A}^{I\,s} : \mathcal{D}\left(\Delta t\mathbf{D}\right) \tag{2.110}$$

où $\mathbf{A}^{I\,s}$ représente la partie symétrique du tenseur de concentration $\mathbf{A}^I$ du grain I. En d'autres termes, $\mathbf{A}^{I\,s}$ vérifie :

$$\forall\, i,j,k,l = 1,2,3 : \quad A_{ijkl}^{I\,s} = \frac{1}{4}\left(A_{ijkl}^I + A_{ijlk}^I + A_{jikl}^I + A_{jilk}^I\right) \tag{2.111}$$

En appliquant une règle de moyenne volumique à la relation (1.118), on obtient :

$$\mathcal{D}\left(\Delta\boldsymbol{\Sigma}\right) = f^I\, \mathbf{c}_c^{ep\,I} : \mathbf{A}^{I\,s} : \mathcal{D}\left(\Delta t\mathbf{D}\right) \quad ; \quad I = 1,...,N_g \tag{2.112}$$

Nous rappelons que f^I est la fraction volumique du grain I et $\mathbf{c}_c^{ep\,I}$ son module tangent cohérent. De la relation (2.112), on peut déduire que le module tangent cohérent macroscopique $\mathbf{L}_c$ peut être calculé par la relation suivante :

$$\mathbf{L}_c = f^I \, \mathbf{c}_c^{ep\,I} : \mathbf{A}^{I\,s} \quad ; \quad I = 1,...,N_g \tag{2.113}$$

Dans la section présente, nous montrons l'influence du choix du module tangent cohérent sur la vitesse de convergence du calcul. Pour cela, nous avons simulé un essai de traction uniaxiale appliqué à un polycristal dont les propriétés mécaniques sont celles définies dans le Section 2.4. L'élasticité ainsi que l'écrouissage sont supposés isotropes. En analysant les résultats de plusieurs simulations (que nous ne détaillerons pas dans ce manuscrit par souci de lisibilité), nous avons remarqué que le module tangent cohérent n'influence significativement la vitesse de convergence du calcul que lorsque le pas de temps imposé est assez élevé, (typiquement lorsqu'il est supérieur à $10^{-3}\,\mathrm{s}$). Cependant, le modèle autocohérent ne peut converger qu'avec des pas de temps suffisamment faibles (de l'ordre de $5\times10^{-5}\,\mathrm{s}$). Rappelons que cette restriction sur la taille des pas de temps est liée au caractère fortement non-linéaire des équations associées au modèle autocohérent. Ainsi, la comparaison entre l'utilisation du module tangent cohérent et celle du module tangent analytique n'est pertinente que dans le cas du modèle de Taylor-Lin. Pour les résultats donnés dans la Fig. 2.50, le pas de temps utilisé est fixé à $10^{-3}\,\mathrm{s}$. On peut remarquer que lorsqu'on utilise le module tangent cohérent, la convergence du calcul itératif requiert moins d'itérations surtout dans les premiers incréments de calcul. En effet, au début du calcul, l'activité des systèmes de glissement est très variable et requiert plusieurs subdivisions du pas de temps imposé (voir la Section 1.3.1.2). Dans ce cas de figure, le module tangent cohérent est très différent du module tangent analytique (voir la Section 1.3.3). À partir d'un certain niveau de déformation, l'activité des systèmes se stabilise, limitant ainsi le nombre de subdivisions du pas de temps imposé. Il en résulte que le module tangent cohérent se confond avec le module tangent analytique. Par conséquent, les deux modules tangents engendrent le même nombre d'itérations nécessaires à la convergence du calcul.

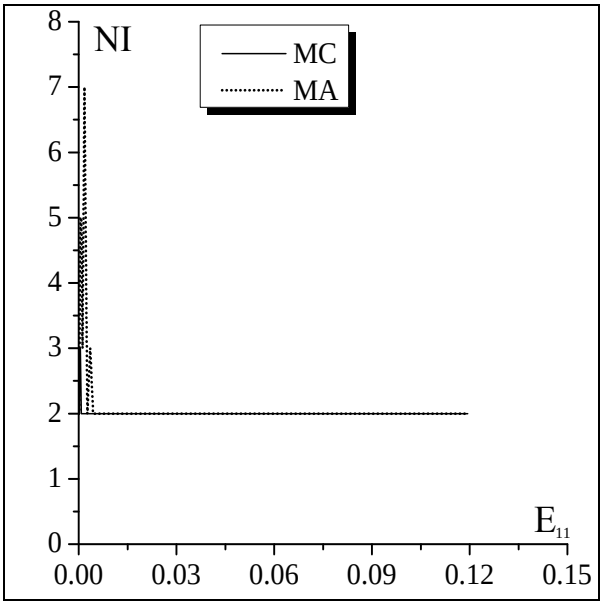


Fig. 2.50. Nombre d'itérations (NI) nécessaires à la convergence de la simulation d'un essai de traction uniaxiale (le comportement du polycristal est modélisé par le schéma de Taylor–Lin) : comparaison entre le module tangent cohérent (MC) et le module tangent analytique (MA).

2.4.12 Validation expérimentale du modèle multi-échelle

Cette section a pour objectif de valider le modèle autocohérent, en comparant les prédictions numériques obtenues à des résultats expérimentaux. À cette fin, nous avons utilisé des données expérimentales relatives à des essais de traction uniaxiale effectués sur un acier monophasé ferritique. Ces essais ont été réalisés chez ArcelorMittal et les données associées ont été reprises des thèses de Lorrain (2005) et Franz (2008). Les caractéristiques mécaniques de l'acier étudié ainsi que sa composition chimique sont données dans le Tab. 2.3 et le Tab. 2.4, respectivement.

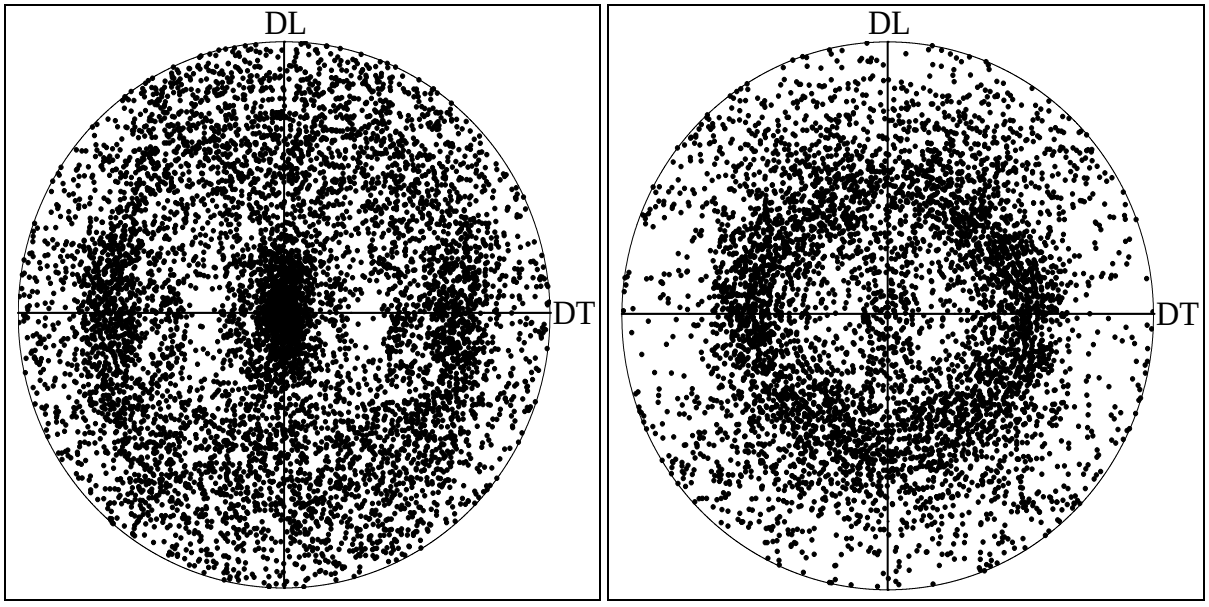
Résistance à la rupture	Déf. homogène maximale	Déformation à la rupture
295 MPa	0,238	0,422

Tab. 2.3. Caractéristiques mécaniques de l'acier monophasé ferritique.

% C	% Si	% Mn	% P	% S	% N	% Al	% Ti	% Mo	% Fe
0,002	0,006	0,088	0,007	0,006	0,057	0,0047	0,071	0,003	99,7553

Tab. 2.4. Composition chimique de l'acier monophasé ferritique.

Les orientations cristallographiques des grains constituant le volume élémentaire statistiquement représentatif du matériau ont été déterminées par diffraction aux rayons X suivie d'une extraction d'une fonction de distribution (comprenant 5000 orientations). Pour optimiser les temps de calcul lors des simulations numériques, la texture initiale du polycristal que nous choisissons est restreinte à 2000 grains. La Fig. 2.51 montre les figures de pôles {111} et {110} définissant cette texture initiale.



(a) (b)

Fig. 2.51. Texture cristallographique initiale de l'acier monophasé ferritique : (a) figure de pôles {111} ; (b) figure de pôles {100}.

Afin de prédire la réponse rhéologique de l'acier étudié par le modèle autocohérent proposé, une procédure d'identification des paramètres microstructuraux du matériau est mise en place. À la différence de toutes les autres simulations numériques présentées dans ce chapitre, nous considérons cette fois-ci comme matrice d'écrouissage celle développée par Francoisi (1984), Tabourot (1992) et Hoc (1999) qui prend en compte la création, le stockage et l'annihilation des dislocations à l'échelle locale. Les détails sur la définition de cette matrice d'écrouissage sont donnés dans l'équation (1.22) de la Section 1.2.3. Les paramètres microstructuraux à identifier sont la taille moyenne des grains (D_{moy}), le paramètre g_0 correspondant au stockage des dislocations, la distance d'annihilation critique des dislocations de signes contraires (y_c), les cissions critiques initiales τ_0 et les densités de dislocations moyennes initiales ρ_0 des systèmes de glissement (qui sont supposées identiques pour tous les systèmes de glissement des différents grains constituant le polycristal). Certains de ces paramètres peuvent être identifiés à travers une micrographie de l'acier. C'est le cas de la taille moyenne des grains D_{moy} qui est assez proche de 20 µm. Les autres paramètres sont identifiés sur la base des courbes rhéologiques expérimentales disponibles. En effet, l'algorithme génétique implanté par défaut dans le logiciel de calcul MATLAB est utilisé pour minimiser une fonction coût représentant l'écart, au sens des moindres carrés, entre les données expérimentales et les résultats numériques. Cette fonction coût a comme arguments 5 paramètres à savoir g_0, y_c, D_{moy}, τ_0, ρ_0. Les valeurs finales minimisant la fonction coût sont données dans le Tab. 2.5. Par ailleurs, le produit $\frac{e_g\mu}{2}$ (voir l'équation (1.22)) est fixé à $0{,}19\times10^5$. La matrice d'élasticité utilisée est isotrope et ses

paramètres sont les mêmes que ceux utilisés dans les sections précédentes (voir par exemple la Section 1.4.2). Ces paramètres d'élasticité correspondent en effet à celles de l'acier étudié.

g_0	y_c	D_{moy}	τ_0	ρ_0
177,26	2 nm	20 µm	21 MPa	$0{,}63\times10^{8}$ m^{-2}

Tab. 2.5. Paramètres microscopiques identifiés.

La Fig. 2.52 montre la pertinence de la procédure d'identification que nous avons utilisée. La courbe en trait continu correspond à la courbe de traction uniaxiale (suivant la direction de laminage). La courbe en trait pointillé correspond à la courbe de traction numérique obtenue après identification des différents paramètres microstructuraux (Tab. 2.5) en se basant sur la courbe expérimentale. On peut remarquer une différence assez faible entre les contraintes mesurées et les contraintes prédites pour une certaine gamme de déformation allant de $E_{11}=0$ à $E_{11}=0,24$. Au-delà de cette gamme de déformation, on observe une très bonne concordance entre les données expérimentales et les simulations numériques.

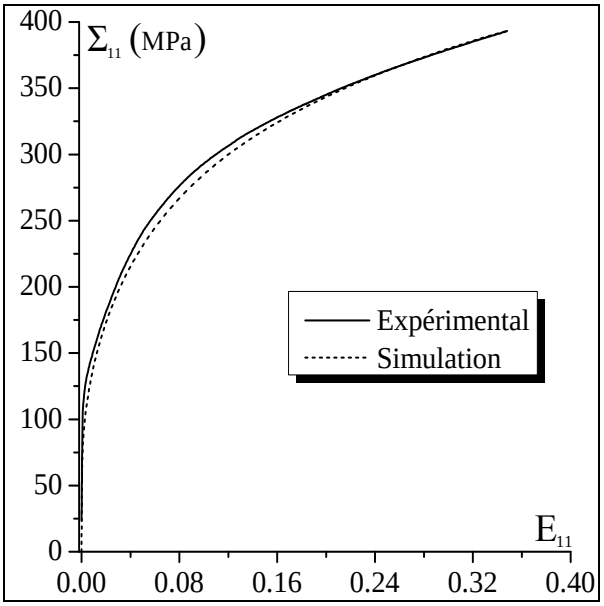


Fig. 2.52. Identification des paramètres microstructuraux relatifs au polycristal utilisé.

Les paramètres identifiés sont ensuite utilisés pour simuler des essais de traction uniaxiale sur des échantillons découpés suivant des orientations de 45° et 90° par rapport à la direction de laminage. Les résultats obtenus sont comparés sur la Fig. 2.53 aux données expérimentales correspondantes. Les tendances obtenues sont assez satisfaisantes. En effet, sur la Fig. 2.53(b), où l'échantillon est découpé suivant un angle de 90°, la courbe déterminée par simulation numérique coïncide avec la courbe expérimentale au-delà d'une certaine gamme de déformation. Cette tendance est très similaire à celle que l'on observe sur la figure d'identification (Fig. 2.52). Sur la Fig. 2.53(a), où l'échantillon est découpé suivant un angle de 45°, la courbe simulée se distingue de la courbe expérimentale sur toute

la gamme de déformation imposée. Cependant, l'écart entre les deux courbes reste relativement faible. Ce résultat confirme la pertinence de notre procédure d'identification et la fiabilité de nos paramètres identifiés.

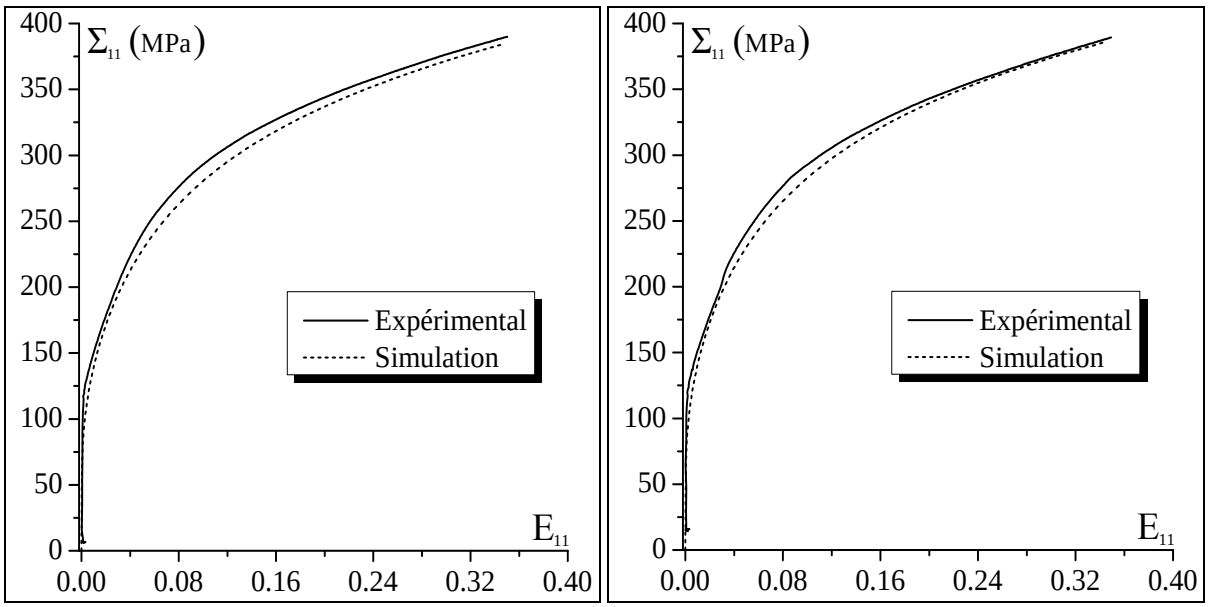


Fig. 2.53. Comparaison entre les données expérimentales et les simulations numériques : (a) échantillon découpé suivant un angle de 45° par rapport à la direction de laminage ; (b) échantillon découpé suivant un angle de 90° par rapport à la direction de laminage.

2.5 Conclusions

Dans ce chapitre, le modèle autocohérent adapté aux grandes déformations élastoplastiques a été revisité. Une interaction élastoplastique entre l'échelle locale et l'échelle macroscopique a été établie à travers une équation intégrale cinématique du gradient de vitesse. Par la suite, le tenseur de concentration reliant le gradient de vitesse microscopique au gradient de vitesse macroscopique a été déduit de cette équation intégrale. D'un point de vue numérique, une nouvelle méthode itérative de type Newton–Raphson a été proposée, en remplacement de la méthode usuelle du point fixe, pour intégrer les relations constitutives du modèle autocohérent et ainsi améliorer notablement la performance de la résolution numérique de ces relations. Le modèle autocohérent a ensuite été comparé au modèle de Taylor–Lin à travers diverses simulations numériques. Il est apparu que le modèle autocohérent donne qualitativement de meilleurs résultats que celui de Taylor–Lin, en termes d'estimation des contraintes résiduelles, de la texture cristallographique finale, et de la texture morphologique. Par ailleurs, diverses études de sensibilité ont été menées. En se basant sur les différentes simulations, il est apparu que le modèle de Taylor–Lin conduit à des courbes contrainte–déformation macroscopique beaucoup plus raides que celles obtenues avec le modèle autocohérent et que les composantes de cisaillement du module tangent macroscopique calculées par le modèle de

Taylor–Lin sont plus élevées que celles prédites par le modèle autocohérent. Par ailleurs, les deux modèles de transition d'échelles sont peu sensibles au modèle d'élasticité choisi. En revanche, l'écrouissage anisotrope, la texture cristallographique initiale, la structure cristallographique et enfin la loi d'écoulement ont une influence assez importante sur les réponses macroscopiques du matériau lorsqu'on utilise ces deux modèles. Par ailleurs, les deux modèles micromécaniques ont été utilisés pour simuler un essai de flexion 3 points avec retour élastique sur une poutre métallique. L'objectif étant de montrer l'application des modèles développés au calcul de structure. Le modèle autocohérent a été également validé en comparant quelques résultats expérimentaux (des essais de traction uniaxiale) avec les prédictions numériques obtenues avec ce modèle. Ce trajet de déformation n'est toutefois pas représentatif des déformations que subissent les pièces métalliques lors des opérations de mise en forme. Une série de simulations devrait être effectuée à l'avenir afin de s'assurer des capacités du modèle autocohérent à prédire des réponses rhéologiques, des surfaces de charge, et des textures induites lors de trajets de déformations séquentiels. Dans le Chapitre 3, le modèle de comportement du polycristal ainsi implanté sera couplé à des critères d'apparition de striction localisée afin de prédire les courbes limites de formage.

Chapitre 3

Prédiction de la striction localisée dans les matériaux polycristallins élastoplastiques

3.1 Introduction

Depuis plusieurs décennies, l'étude des phénomènes limitant la ductilité des matériaux métalliques en général, et la formabilité des tôles métalliques en particulier (tel que le flambement, le plissement, la striction diffuse ou la striction localisée), a suscité l'intérêt des scientifiques. Malgré les avancées majeures réalisées dans la compréhension de ces instabilités plastiques, leurs modélisations demeurent encore un sujet ouvert et un domaine actif de recherche. Il est actuellement bien connu que l'apparition des instabilités plastiques dépend aussi bien de la géométrie de la pièce que du matériau la constituant. Dans le cas du flambement par exemple, le caractère géométrique joue un rôle prédominant. Dans le cas de la striction localisée, c'est le comportement du matériau qui influence surtout l'apparition de ce type d'instabilité. Dans cette étude, nous nous restreindrons aux instabilités de type matériau, en l'occurrence l'analyse de la striction localisée. Dans le domaine de la prédiction de la striction localisée, nous pouvons citer les travaux pionniers de Keeler et Backofen (1963) ou Godwin (1968) qui ont introduit le concept de Courbe Limite de Formage (CLF) pour caractériser la ductilité des tôles métalliques. Cette courbe, tracée dans l'espace des déformations principales dans le plan de la tôle, représente les déformations limites correspondant aux différents trajets de déformation allant de la traction uniaxiale ($\rho = -0.5$) à l'expansion équibiaxiale ($\rho = 1$). Ainsi, tous les états de déformation se situant au-dessus de cette courbe entraînent l'apparition potentielle d'une striction localisée sur la pièce déformée. Les CLF peuvent être déterminées expérimentalement. Cependant, les difficultés liées à la précision des mesures expérimentales ainsi que leurs coûts élevés ont orienté les chercheurs vers le développement de modèles prédictifs de ductilité. Les essais expérimentaux n'interviennent qu'en

fin d'étude pour évaluer le degré de prédictibilité des modèles développés. La modélisation de la ductilité des matériaux métalliques nécessite, d'une part, l'utilisation d'une loi de comportement pour décrire l'évolution des variables mécaniques et, d'autre part, un couplage de cette loi de comportement avec un critère de localisation afin de prédire l'état de déformation marquant le début de la striction localisée. Initialement, des modèles phénoménologiques ont été utilisés pour modéliser le comportement mécanique. À ce titre, nous pouvons citer les travaux de Hill (1952), où un modèle rigide-plastique isotrope a été associé à un critère de ductilité, connu sous le nom de critère de taux d'extension nul, pour prédire la partie gauche de la CLF. Plus tard, Marciniak et Kuczynski (1967) ont introduit un nouveau critère de ductilité basé sur une approche par imperfection initiale. Dans cette dernière référence (Marciniak et Kuczynski, 1967), ce nouveau critère a été associé à un modèle de comportement rigide-plastique isotrope (le même que celui utilisé dans Hill (1952)) pour déterminer la partie droite de la CLF. La plupart des études menées sur la prédiction numérique des CLF ont démontré que la forme et le niveau des courbes sont fortement dépendants des propriétés mécaniques et physiques du matériau. Ainsi, une variété de modèles de comportement phénoménologiques a été couplée à divers critères de localisation afin d'étudier l'effet de quelques paramètres mécaniques, tels que la vitesse de déformation (Ghosh, 1977 ; Hutchinson et Neale, 1978c ; Neale et Chater, 1980 ; Khan et Baig, 2011 ; Manopulo et al., 2015), l'anisotropie plastique (Neale et Chater, 1980 ; Cao et al., 2000 ; Kuroda et Tvergaard, 2000 ; Wu et al., 2004 ; Zhang et Wang, 2012), la température (Khan et Baig, 2011 ; Manopulo et al., 2015), l'adoucissement par endommagement (Haddag et al., 2009 ; Abed-Meraim et al., 2014 ; Mansouri et al., 2014 ; Chalal et Abed-Meraim, 2015), sur la ductilité. En dépit de leurs bonnes capacités prédictives, ce qui explique en partie leur large utilisation pour la prédiction des CLF, les modèles phénoménologiques ne permettent pas de prendre en compte l'influence des aspects microstructuraux du matériau (tel que la forme des grains, la texture cristallographique, etc.) sur les déformations limites. Ces limitations sont les principales motivations de l'utilisation récente des modèles de comportement micromécaniques pour la prédiction des CLF. L'avantage de ces nouveaux modèles (plus proches de la physique du matériau que les modèles phénoménologiques) réside dans leurs capacités à relier explicitement la microstructure du matériau à ses propriétés mécaniques d'usage (résistance, formabilité, etc.). En effet, dans la modélisation micromécanique, les relations constitutives sont formulées à l'échelle microscopique du monocristal. Ces équations constitutives décrivent les mécanismes de déformation pertinents à cette échelle, tel que l'écrouissage résultant de la propagation des dislocations, le glissement selon les plans cristallographiques, la rotation du réseau cristallographique, etc. Le comportement macroscopique de l'agrégat polycristallin est ensuite déduit de celui de ses constituants microscopiques en appliquant des schémas de transition d'échelles. De ce fait, la prédiction de CLF par une approche micromécanique repose sur trois ingrédients principaux : une modélisation des relations constitutives à l'échelle du monocristal, un schéma de transition d'échelles pour déduire le comportement mécanique à l'échelle macroscopique et un critère de localisation pour détecter l'apparition de la striction localisée.

- **Modélisation à l'échelle du monocristal :** Dans le cadre de la prédiction numérique des CLF, divers modèles de comportement monocristallin ont été adoptés. Ces modèles, formulés dans le cadre des grandes déformations, peuvent être classés en deux grandes catégories : les modèles (élasto) viscoplastiques et les modèles élastoplastiques. Dans la famille des modèles prenant en compte la sensibilité à la vitesse de déformation (modèles viscoplastiques ou élastoviscoplastiques), on peut citer par exemple les travaux de Tóth et al. (1996), Wu et al. (1997, 1998, 2004), Boudeau et al. (1998), Inal et al. (2005), Neil et Agnew (2009), Signorelli et al. (2009), Lévesque et al. (2010), Kim et al. (2013), Schwindt et al. (2015). Pour la classe des modèles basés sur une formulation indépendante de la vitesse de déformation (modèles élastoplastiques), nous citerons les travaux de Knockaert et al. (2002), Franz et al. (2009a, 2009b, 2013), Yoshida et Kuroda (2012). Les travaux précédemment cités ont été dédiés à la prédiction de la formabilité des tôles métalliques à structure cristallographique cubique (en l'occurrence CFC et CC). Dans la présente étude, une approche élastoplastique est utilisée pour modéliser le comportement mécanique des monocristaux de type CFC. Les relations constitutives à l'échelle microscopique ainsi que le schéma d'intégration numérique adopté ont été largement détaillés dans le Chapitre 1 de ce document.
- **Schéma de transition d'échelles :** En raison de sa simplicité, le schéma de transition d'échelles de type Taylor–Lin a largement servi à la prédiction des CLF des matériaux élastoplastiques (Knockaert et al., 2002 ; Yoshida et Kuroda, 2012), rigide-viscoplastiques (Tóth et al., 1996 ; Boudeau et al., 1998 ; Inal et al., 2005) et élastoviscoplastiques (Lévesque et al., 2010). En effet, l'hypothèse d'homogénéité de la déformation, sur laquelle repose le modèle de Taylor–Lin, simplifie substantiellement son implantation numérique. Il en résulte que les temps de calcul (CPU) nécessaires pour prédire la réponse macroscopique en utilisant ce schéma sont considérablement réduits par rapport aux autres modèles de transition d'échelles. Cependant, cette hypothèse simplificatrice d'homogénéité de la déformation dans le matériau conduit à des prédictions numériques imprécises, comme c'est discuté au second chapitre de ce document. Afin d'obtenir une meilleure adéquation entre les résultats expérimentaux et les prédictions numériques, le schéma autocohérent a été récemment utilisé pour déterminer principalement les limites de formabilité des matériaux viscoplastiques (Signorelli et al., 2009 ; Serenelli et al., 2010 ; Serenelli et al., 2011 ; Signorelli et al., 2012 ; Bertinetti et al., 2014 ; Schwindt et al., 2015), et dans une moindre mesure les limites de formabilité des matériaux élastoplastiques (Franz et al., 2009a, 2009b, 2013). Dans ce chapitre, la version incrémentale élastoplastique du modèle autocohérent est adoptée pour modéliser le comportement mécanique des agrégats polycristallins. Nous rappelons que la formulation théorique ainsi que le schéma d'intégration numérique des équations relatives au modèle autocohérent sont extensivement discutés dans le Chapitre 2.

- **Prédiction de la striction localisée :** L'apparition de la localisation de la déformation plastique peut être interprétée comme étant une bifurcation à partir d'un état de déformation homogène ou alors une évolution d'une imperfection initiale dans le matériau vers une taille critique. À ce titre, deux critères de localisation peuvent être associés au modèle de comportement micromécanique, en vue de prédire les CLF : l'approche par imperfection initiale et l'analyse par bifurcation. Comme mentionné précédemment, l'approche par imperfection initiale a été introduite pour la première fois par Marciniak et Kuczynski (1967), qui ont couplé ce critère à une loi de comportement phénoménologique. Dans la suite de ce manuscrit, cette approche sera désignée sous le terme d'approche M–K. L'approche M–K est sans doute le critère de localisation le plus utilisé dans la littérature. Ce critère repose sur l'hypothèse de l'existence d'une imperfection initiale dans le matériau, sous la forme d'une variation locale de l'épaisseur (imperfection initiale de type géométrique) ou des propriétés physiques (imperfection initiale de type matériau). Cette imperfection initiale affecte l'écoulement plastique et induit une striction localisée lorsqu'elle atteint une taille critique. Dans sa version initiale, l'approche M–K a été appliquée en considérant une imperfection de type matériau dans le plan de la tôle, formant une bande perpendiculaire à la direction de laminage. Sous l'effet d'un chargement biaxial appliqué à la tôle, la déformation va se concentrer beaucoup plus dans la bande que dans le reste de la tôle, entraînant ainsi un amincissement localisé dans la bande. Dans la littérature, l'approche M–K a été le plus souvent couplée à des modèles de comportement phénoménologiques. Néanmoins, ces dernières années, de plus en plus de modèles de comportement micromécaniques sont couplés à cette approche. À titre d'exemple, nous mentionnons l'utilisation du modèle de Taylor–Lin pour prédire les CLF des matériaux élastoviscoplastiques (Wu et al., 1997, 1998, 2004 ; Inal et al., 2005) et élastoplastiques (Knockaert et al., 2002 ; Yoshida et Kuroda, 2012). Plus récemment, l'approche M–K a été associée au modèle autocohérent pour prédire les CLF de divers matériaux rigides viscoplastiques (Neil et Agnew, 2009 ; Signorelli et al., 2009 ; Signorelli et Bertinetti, 2009 ; Serenelli et al., 2010 ; Serenelli et al., 2011 ; Bertinetti et al., 2014 ; Schwindt et al., 2015). Dans la présente étude, il s'agit d'associer le critère de Marciniak et Kuczynski à l'approche incrémentale autocohérente formulée dans le cadre des grandes déformations élastoplastiques, pour prédire l'apparition de la striction localisée. À la connaissance de l'auteur, c'est la première fois que l'approche M–K est couplée à la forme élastoplastique incrémentale du modèle autocohérent pour prédire des CLF. L'approche M–K est gouvernée par deux relations principales : la relation de compatibilité et la relation d'équilibre. La combinaison de ces deux relations permet de former un système mathématique fortement non-linéaire. Dans la littérature, ce système est résolu par la méthode de Newton–Raphson (Neil et Agnew, 2009 ; Signorelli et al., 2009 ; Signorelli et Bertinetti, 2009 ; Serenelli et al., 2010 ; Serenelli et al., 2011 ; Bertinetti et al., 2014) ou par des

algorithmes de minimisation, tel que la méthode de Nelder–Mead (Kim et al., 2013). Plus récemment, Schwindt et al. (2015) ont introduit une '*approche directe*' pour contourner la méthode de Newton–Raphson sans perte d'efficacité et de robustesse des algorithmes de résolution. Dans la présente étude, la méthode de Newton–Raphson est utilisée pour résoudre les équations de l'approche M–K. Ces équations sont au préalable reformulées dans le repère local lié à la bande, de manière à ce que l'on obtienne une forme beaucoup plus simple de la matrice jacobienne. Cette forme optimisée des équations relatives à l'approche M–K est particulièrement efficace, au sens où le nombre total d'itérations nécessaires à la convergence du calcul sur un incrément de temps n'excède pas 5. Il faut préciser que l'approche M–K adoptée dans cette étude est formulée comme un problème bidimensionnel (i.e., le vecteur normal qui définit l'orientation de la bande demeure dans le plan de la tôle tout au long de la déformation), ce qui est obtenu par l'application de l'hypothèse des contraintes planes, conformément à la plupart des travaux de la littérature. Hutchinson et al. (1978a) ont démontré la validité de cette hypothèse pour le cas des tôles minces.

Le second critère de localisation que nous investiguons est basé sur la théorie de bifurcation (Rudnicki et Rice, 1975 ; Stören et Rice, 1975 ; Rice, 1976). Avec cette approche, le phénomène de localisation est considéré comme étant le résultat d'une instabilité dans les relations constitutives qui décrivent la déformation homogène du matériau. Ainsi, l'apparition de la striction localisée est une conséquence de la discontinuité du gradient de vitesse dans le matériau. Il faut préciser que, outre ses fondements théoriques solides, l'approche par bifurcation ne requiert aucun paramètre d'ajustement comme c'est le cas de l'approche M–K, où la taille de l'imperfection initiale est souvent utilisée comme paramètre d'ajustement. Cependant, sans la prise en compte d'effets déstabilisants dans la modélisation du comportement du matériau, il n'est pas possible avec la théorie de bifurcation de prédire la striction localisée à des niveaux de déformations réalistes pour des trajets de déformation positifs (Ben Bettaieb et Abed-Meraim, 2015). Une tendance similaire est observée lorsque le comportement mécanique présente une sensibilité à la vitesse de déformation. En effet, avec les modèles élastoviscoplastiques, les déformations limites prédites par la théorie de bifurcation sont très élevées, car ces dernières sont entièrement gouvernées par le comportement élastique. Cependant, l'application du critère de bifurcation en conjonction avec un modèle micromécanique élastoplastique permet d'obtenir l'des déformations limites réalistes. Ce résultat s'explique par le fait que certains effets déstabilisants, qui sont à l'origine de la localisation de la déformation, sont une conséquence naturelle de la théorie élastoplastique en plasticité cristalline, où la surface de charge associée au critère de Schmid présente des points de vertex. Dans ce cadre, Franz et al. (2009a, 2009b, 2013) ont couplé l'approche autocohérente élastoplastique avec le critère de bifurcation pour prédire les limites de formabilité de divers

matériaux de type CC. Il faut souligner que Franz et ses co-auteurs ont formulé le critère de bifurcation dans un cadre tridimensionnel permettant ainsi de détecter des modes de localisation suivant l'épaisseur de la tôle (en effet, l'orientation de la bande de localisation n'est plus contrainte dans le plan de la tôle). Par ailleurs, Yoshida et Kuroda (2012) ont couplé l'approche par bifurcation avec le modèle de Taylor–Lin pour prédire les déformations limites des matériaux de type CFC. Dans leur étude, l'hypothèse de contraintes planes a été adoptée, ce qui conditionne leur modèle à une forme bidimensionnelle (où l'orientation de la bande de localisation ne peut s'effectuer que dans le plan de la tôle). La même démarche est reprise dans cette étude, à la différence que le schéma de transition d'échelles de type autocohérent est implanté à la place du modèle de Taylor–Lin. Par rapport aux travaux de Franz et al. (2009a, 2009b, 2013), la principale motivation du choix d'une formulation bidimensionnelle est de pouvoir comparer l'approche de bifurcation à l'approche M–K qui est largement formulée dans un cadre bidimensionnel dans la littérature.

La suite du chapitre est organisée comme suit :

- ✓ Dans la seconde section, nous présentons le cadre théorique des deux critères de localisation (à savoir l'approche par bifurcation et celle par imperfection initiale), ainsi que leurs couplages respectifs avec le modèle de comportement du matériau. Les différentes équations du modèle de prédiction de ductilité résultant de ce couplage sont décrites dans une configuration eulérienne, qui est particulièrement adaptée aux modèles de comportement développés dans le Chapitre 2.
- ✓ La troisième section est consacrée à l'implantation numérique du modèle de prédiction de ductilité.
- ✓ Dans la quatrième section, nous étendons le modèle développé pour prédire la ductilité des tôles bicouches. Ces matériaux sont formés d'une couche de métal, à laquelle s'ajoute un revêtement en élastomère.
- ✓ Les différents résultats numériques obtenus sont discutés en détails dans la cinquième section de ce chapitre. En effet, cette section est scindée en trois parties. La première partie traite de la prédiction des CLF des tôles métalliques, basée respectivement sur l'approche par bifurcation et l'approche M–K. La seconde partie traite des résultats numériques relatifs aux bicouches. Dans la dernière partie, nous présentons quelques simulations de procédés de mise en forme, réalisées par couplage du modèle de comportement autocohérent à la méthode des éléments finis. En effet, le modèle de transition d'échelles autocohérent est implanté sous la forme d'une subroutine UMAT pour des calculs de structure par éléments finis. Par ailleurs, il faut souligner que la structure cristallographique des matériaux étudiés dans cette section est principalement de type CFC.

3.2 Formulations des critères de localisation de la déformation

3.2.1 État de contraintes planes et relations constitutives bidimensionnelles

Nous considérons ici une déformation quasi-statique d'une tôle métallique sous chargement bidimensionnel. Les différentes variables mécaniques sont exprimées dans un repère orthonormé $(\vec{\mathbf{x}}_1, \vec{\mathbf{x}}_2, \vec{\mathbf{x}}_3)$, lié à la tôle (Fig. 3.1). Les axes $\vec{\mathbf{x}}_1$, $\vec{\mathbf{x}}_2$ et $\vec{\mathbf{x}}_3$ coïncident respectivement avec la direction de laminage, la direction transverse et la direction normale au plan de la tôle.

Conformément à la plupart des travaux de la littérature, l'hypothèse de contraintes planes est adoptée dans la formulation des critères de localisation des tôles minces. Hutchinson et al. (1978a) ont démontré la validité d'une telle hypothèse. Cette condition de contraintes planes se traduit par la nullité des composantes hors-plan du tenseur des contraintes de Cauchy $\mathbf{\Sigma}$ (voir la Fig. 3.1)

$$\mathbf{\Sigma}.\vec{\mathbf{x}}_3 = \vec{\mathbf{0}} \Leftrightarrow \Sigma_{13} = \Sigma_{23} = \Sigma_{33} = 0 \tag{3.1}$$

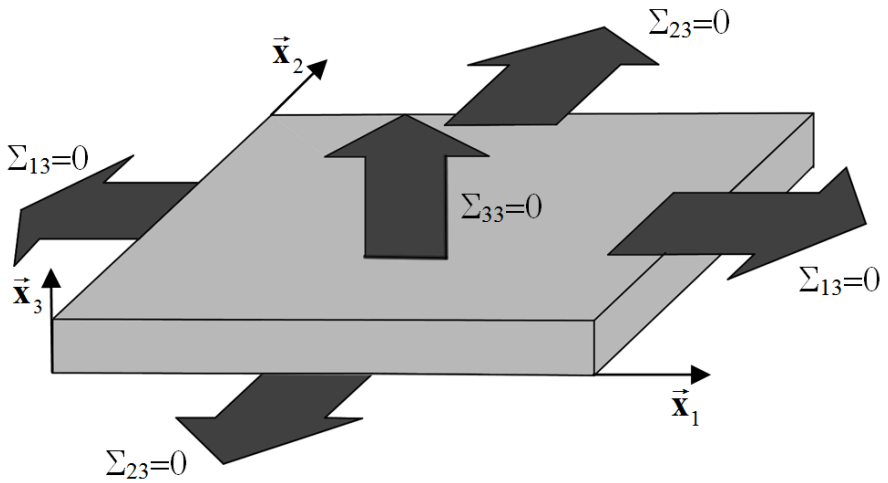


Fig. 3.1. Tôle métallique soumise à un état de contraintes planes.

Le cadre théorique présenté dans cette section ainsi que les différentes simulations numériques qui s'y rapportent, qui sont détaillées dans les Sections 3.5.1–3.5.2, traitent des matériaux à structure cristallographique orthotrope. Pour ce type de matériaux, la condition de contraintes planes implique que les composantes hors-plan du gradient de vitesse macroscopique sont égales à zéro (Knockaert et al., 2000 ; Signorelli et al., 2009 ; Yoshida et Kuroda, 2012 ; Tadano et al., 2013)

$$G_{13} = G_{31} = G_{23} = G_{32} = 0 \tag{3.2}$$

Contrairement aux travaux ci-dessus mentionnés, les mesures de contrainte et de déformation que nous adoptons dans cette étude (pour exprimer les équations constitutives du polycristal) sont respectivement le taux de contrainte nominale $\dot{\mathbf{N}}$ et le gradient de vitesse $\mathbf{G}$. Ainsi, la condition de contraintes planes (3.1) peut être reformulée comme suit :

$$\dot{N}_{13} = \dot{N}_{31} = \dot{N}_{23} = \dot{N}_{32} = \dot{N}_{33} = 0 \tag{3.3}$$

L'équivalence entre les deux formulations, à savoir les relations (3.1) et (3.3), est démontrée dans les lignes qui suivent.

En effet, $\dot{\mathbf{N}}$ est relié à $\dot{\mathbf{\Sigma}}$ à travers une relation macroscopique qui se présente sous la même forme que celle établie à l'échelle microscopique (confère Eq. (1.46)) :

$$\dot{\mathbf{N}} = \mathrm{J}\,\mathbf{F}^{-1}.\left(\dot{\mathbf{\Sigma}} + \mathbf{\Sigma}\,\mathrm{Tr}(\mathbf{D}) - \mathbf{G}.\mathbf{\Sigma}\right) \tag{3.4}$$

En adoptant une approche lagrangienne actualisée (dans laquelle J et $\mathbf{F}$ sont respectivement égaux à 1 et $\mathbf{I}_2$), comme c'est le cas à l'échelle microscopique, la relation (3.4) se réduit à l'expression suivante :

$$\dot{\mathbf{N}} = \dot{\mathbf{\Sigma}} + \mathbf{\Sigma}\,\mathrm{Tr}(\mathbf{D}) - \mathbf{G}.\mathbf{\Sigma} \tag{3.5}$$

Lorsque l'équation (3.1) est satisfaite, la relation (3.5) peut s'écrire sous la forme indicielle suivante :

$$\forall\, \mathrm{m} = 1,2,3: \quad \begin{cases} \dot{\mathrm{N}}_{\mathrm{m3}} = \dot{\Sigma}_{\mathrm{m3}} + \Sigma_{\mathrm{m3}}\,\mathrm{Tr}(\mathbf{D}) - \mathrm{G}_{\mathrm{mp}}\,\Sigma_{\mathrm{p3}} = 0 \\ \dot{\mathrm{N}}_{\mathrm{3m}} = \dot{\Sigma}_{\mathrm{3m}} + \Sigma_{\mathrm{3m}}\,\mathrm{Tr}(\mathbf{D}) - \mathrm{G}_{\mathrm{3p}}\,\Sigma_{\mathrm{pm}} = 0 \end{cases} \quad ; \quad \mathrm{p} = 1,2,3 \tag{3.6}$$

Ainsi, la condition exprimée dans l'équation (3.1) implique celle de la relation (3.3).

Réciproquement, si la relation (3.3) est vérifiée, en se basant sur l'équation (3.5), on peut écrire :

$$\begin{aligned} \forall\, \mathrm{m} = 1,2,3: \quad & \dot{\Sigma}_{\mathrm{m3}} = -\Sigma_{\mathrm{m3}}\,\mathrm{Tr}(\mathbf{D}) + \mathrm{G}_{\mathrm{mp}}\,\Sigma_{\mathrm{p3}} \quad ; \quad \mathrm{p} = 1,2,3 \\ & \Sigma_{\mathrm{m3}} = 0 \Rightarrow \dot{\Sigma}_{\mathrm{m3}} = 0 \end{aligned} \tag{3.7}$$

L'équation (3.7) démontre que, lorsque les composantes hors-plan du tenseur des contraintes de Cauchy sont nulles, leurs vitesses le sont également. Une conséquence naturelle de cette propriété est que les composantes hors-plan du tenseur des contraintes de Cauchy restent nulles tout au long de la déformation. Ainsi, la relation (3.3) implique à son tour la condition (3.1).

En se basant sur les relations (3.2) et (3.3), une formulation bidimensionnelle de la loi de comportement du polycristal (voir l'équation (2.1)) peut être établie. En effet, en introduisant l'équation (2.1) dans la dernière relation de l'équation (3.3) (i.e., $\dot{\mathrm{N}}_{33} = 0$), on déduit aisément l'expression de la composante G_{33} du gradient de vitesse en fonction de ses composantes planes $\mathrm{G}_{\gamma\delta}$ ($\gamma, \delta = 1,2$)

$$\mathrm{G}_{33} = -\frac{\mathrm{L}_{33\gamma\delta}}{\mathrm{L}_{3333}}\,\mathrm{G}_{\gamma\delta} \quad ; \quad \gamma, \delta = 1,2 \tag{3.8}$$

En introduisant à présent la relation (3.8) dans l'équation (2.1), on obtient la loi de comportement bidimensionnelle suivante du polycristal :

$$\forall \alpha, \beta = 1,2: \quad \dot{\mathrm{N}}_{\alpha\beta} = \left[\mathrm{L}_{\alpha\beta\gamma\delta} - \frac{\mathrm{L}_{\alpha\beta 33}\,\mathrm{L}_{33\gamma\delta}}{\mathrm{L}_{3333}}\right]\mathrm{G}_{\gamma\delta} \quad ; \quad \gamma, \delta = 1,2 \tag{3.9}$$

Par souci de concision, nous exprimerons cette loi de comportement sous la forme tensorielle suivante :

$$\dot{\mathbf{N}}^{PS} = \mathbf{L}^{PS} : \mathbf{G}^{PS} \tag{3.10}$$

où $\dot{\mathbf{N}}^{PS}$ et $\mathbf{G}^{PS}$ (PS désignant le terme contraintes planes) sont respectivement les tenseurs de taux de contrainte nominale et de gradient de vitesse, restreints au plan de la tôle.

3.2.2 Critère de bifurcation

En matière d'instabilités plastiques de type matériau, la bifurcation s'interprète ici comme étant le passage d'un état de déformation homogène à un état de déformation hétérogène (en d'autres termes, la solution de l'équation d'équilibre au sein du matériau n'est plus unique). Cette perte d'homogénéité de la déformation se manifeste par l'apparition d'une bande de localisation dont la normale $\vec{\mathcal{N}}^{PS} = (\cos\theta, \sin\theta)$ est restreinte au plan de la tôle. L'angle θ désigne l'orientation du vecteur $\vec{\mathcal{N}}^{PS}$ par rapport à la direction de laminage (voir la Fig. 3.2). En effet, sous l'hypothèse de contraintes planes, le problème de localisation associé est supposé bidimensionnel. Comme le montre la Fig. 3.2, le gradient de vitesse plan dans la bande (respectivement en dehors de la bande) est noté $\mathbf{G}^{PS\,B}$ (respectivement $\mathbf{G}^{PS\,H}$), et le taux de contrainte nominale dans la bande (respectivement en dehors de la bande) est noté $\dot{\mathbf{N}}^{PS\,B}$ (respectivement $\dot{\mathbf{N}}^{PS\,H}$).

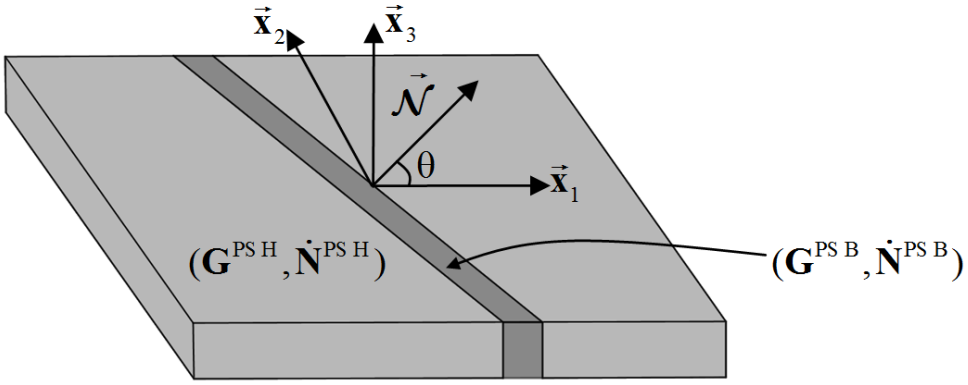


Fig. 3.2. Illustration de la striction localisée dans une tôle métallique.

La condition d'équilibre à l'interface entre la bande et la zone homogène peut être exprimée sous la forme suivante :

$$\vec{\mathcal{N}}^{PS} . [\![\dot{\mathbf{N}}^{PS}]\!] = \vec{\mathbf{0}} \tag{3.11}$$

où $[\![\mathbf{X}]\!] = \mathbf{X}^{B} - \mathbf{X}^{H}$ représente le saut de la variable tensorielle $\mathbf{X}$ à travers la bande.

La relation d'équilibre (3.11) exprime la continuité des densités surfaciques de force de part et d'autre de la bande.

Le théorème de compatibilité de Maxwell stipule l'existence d'un vecteur saut $\dot{\vec{\mathbf{C}}}^{PS}$ tel que le saut du tenseur $\mathbf{G}^{PS}$ à travers la bande vérifie

$$\left[\!\left[\mathbf{G}^{PS}\right]\!\right] = \dot{\vec{\mathbf{C}}}^{PS} \otimes \vec{\mathcal{N}}^{PS} \tag{3.12}$$

La relation de compatibilité (3.12) requiert cependant que l'incrément de déplacement dans le plan de la tôle reste continu en traversant la bande de localisation (Rice, 1976). Le couplage des relations (3.11) et (3.12) en combinaison avec la loi de comportement bidimensionnelle (3.10) permet d'obtenir la relation suivante :

$$\vec{\mathcal{N}}^{PS}.\left(\mathbf{L}^{PS\,H} : \left(\dot{\vec{\mathbf{C}}}^{PS} \otimes \vec{\mathcal{N}}^{PS}\right)\right) = \vec{\mathcal{N}}^{PS}.\left(\left(\mathbf{L}^{PS\,H} - \mathbf{L}^{PS\,B}\right) : \mathbf{G}^{PS\,B}\right) \tag{3.13}$$

En supposant qu'au début de la bifurcation, le module tangent est continu (i.e., $\left[\!\left[\mathbf{L}^{PS}\right]\!\right] = \mathbf{L}^{PS\,B} - \mathbf{L}^{PS\,H} = \mathbf{0}$), on obtient de l'équation (3.13) la relation suivante :

$$\vec{\mathcal{N}}^{PS}.\left(\mathbf{L}^{PS\,H} : \left(\dot{\vec{\mathbf{C}}}^{PS} \otimes \vec{\mathcal{N}}^{PS}\right)\right) = \vec{\mathbf{0}} \tag{3.14}$$

L'équation (3.14) peut être exprimée sous la forme indicielle suivante :

$$\forall \beta = 1,2 : \quad \mathcal{N}_\alpha \left(\mathrm{L}^{PS\,H}_{\alpha\beta\gamma\delta}\, \dot{\mathrm{C}}_\gamma\, \mathcal{N}_\delta \right) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \left(\mathcal{N}_\alpha\, \mathrm{L}^{PS\,H}_{\alpha\beta\gamma\delta}\, \mathcal{N}_\delta \right) \dot{\mathrm{C}}_\gamma = 0 \quad ; \quad \alpha,\gamma,\delta = 1,2 \tag{3.15}$$

Cette dernière équation peut être réécrite sous la forme équivalente suivante :

$$\left(\vec{\mathcal{N}}^{PS}.\mathbf{L}^{PS\,H}.\vec{\mathcal{N}}^{PS}\right).\dot{\vec{\mathbf{C}}}^{PS} = \vec{\mathbf{0}} \tag{3.16}$$

Le tenseur du second ordre $\vec{\mathcal{N}}^{PS}.\mathbf{L}^{PS\,H}.\vec{\mathcal{N}}^{PS}$ est appelé tenseur acoustique bidimensionnel. Lorsque ce dernier est inversible, on obtient une solution évidente de l'équation (3.16), où les composantes du vecteur saut $\dot{\vec{\mathbf{C}}}^{PS}$ sont toutes égales à zéro, et donc la déformation reste homogène. Lorsque le tenseur acoustique bidimensionnel devient singulier, il existe une infinité de vecteurs sauts qui vérifient la relation (3.15), et cela correspond à une bifurcation. La singularité du tenseur acoustique exprimée par l'équation suivante marque donc l'apparition de la striction localisée :

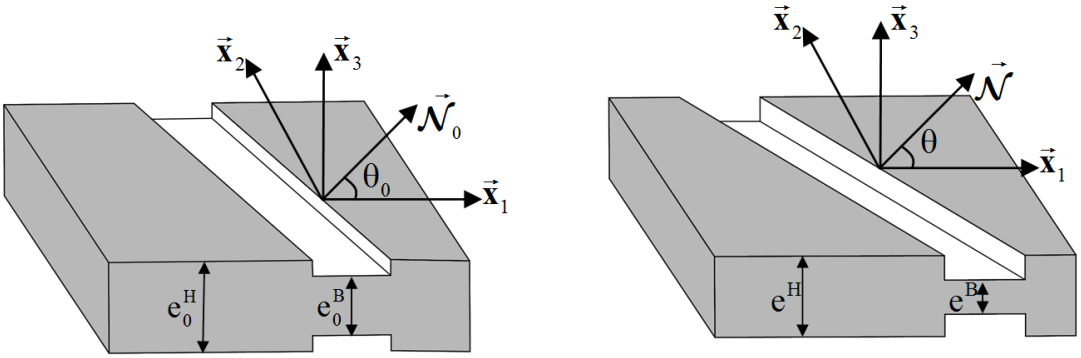
$$\det\left(\vec{\mathcal{N}}^{PS}.\mathbf{L}^{PS\,H}.\vec{\mathcal{N}}^{PS}\right) = 0 \tag{3.17}$$

Le critère (3.17) est connu sous le nom du critère de bifurcation de Rice (Stören et Rice, 1975 ; Rice, 1976). Il a été démontré que ce critère correspond à la perte d'ellipticité des équations aux dérivées partielles gouvernant le problème aux limites.

3.2.3 Critère d'imperfection initiale géométrique

L'approche par imperfection initiale (communément appelée approche M–K) a pour principale hypothèse la préexistence d'une imperfection géométrique dans le matériau tel qu'illustré sur la Fig.

3.3. Similairement au critère de bifurcation, les variables dans la bande (respectivement dans la zone homogène) sont référencées par l'exposant B (respectivement l'exposant H).



(a) (b)

Fig. 3.3. Approche M–K sur une tôle métallique : (a) Configuration initiale de la tôle ; (b) Configuration déformée de la tôle.

Les champs de contrainte et de déformation sont supposés uniformes aussi bien dans la bande de localisation qu'en dehors de la bande. L'épaisseur de la tôle e^B (respectivement e^H) dans sa configuration déformée, est liée à l'épaisseur de la tôle e_0^B (respectivement e_0^H) dans sa configuration initiale, par les relations suivantes :

$$e^H = e_0^H \exp(E_{33}^H) \quad ; \quad e^B = e_0^B \exp(E_{33}^B) \tag{3.18}$$

où E_{33}^B et E_{33}^H sont respectivement les déformations logarithmiques dans la bande et dans la zone homogène, suivant la direction normale au plan de la tôle.

Conformément aux notations de la Fig. 3.3, les imperfections géométriques initiale et courante notées respectivement ξ_0 et ξ se définissent comme suit :

$$\xi_0 = 1 - \frac{e_0^B}{e_0^H} \quad ; \quad \xi = 1 - \frac{e^B}{e^H} \tag{3.19}$$

L'imperfection initiale (respectivement courante) est également caractérisée par l'orientation θ_0 (respectivement θ) de la normale $\vec{\mathcal{N}}_0^{PS}$ (respectivement $\vec{\mathcal{N}}^{PS}$) à la bande de localisation par rapport à la direction de laminage. La loi d'évolution de l'angle θ implique trois grandeurs : l'orientation initiale de la bande θ_0, la déformation logarithmique dans la zone homogène suivant la direction de laminage E_{11}^H, et enfin le trajet de déformation ρ qui n'est autre que le rapport E_{22}^H / E_{11}^H (Hutchinson et Neale, 1978b). Cette loi d'évolution s'exprime sous la forme suivante :

$$\theta = \arctan\left[\tan\theta_0 \exp(1-\rho)\, E_{11}^H\right] \tag{3.20}$$

Outre les relations (3.18)–(3.20), l'approche M–K est basée sur trois équations principales :

- La relation de compatibilité cinématique à l'interface entre la bande et la zone homogène qui est équivalente à l'équation (3.12) valable pour le critère de bifurcation :

$$\mathbf{G}^{PS\,B} = \mathbf{G}^{PS\,H} + \dot{\vec{\mathbf{C}}}^{PS} \otimes \vec{\mathcal{N}}^{PS} \tag{3.21}$$

- La relation d'équilibre des densités surfaciques de forces traversant l'interface :

$$e^{B}\,\mathbf{\Sigma}^{PS\,B}.\vec{\mathcal{N}}^{PS} = e^{H}\,\mathbf{\Sigma}^{PS\,H}.\vec{\mathcal{N}}^{PS} \tag{3.22}$$

Dans le cadre de la formulation eulérienne adoptée dans ce manuscrit, nous utiliserons plutôt une forme différentielle de l'équation (3.22). Cette forme eulérienne se traduit par la relation suivante :

$$e^{B}\,\vec{\mathcal{N}}^{PS}.\dot{\mathbf{N}}^{PS\,B} = e^{H}\,\vec{\mathcal{N}}^{PS}.\dot{\mathbf{N}}^{PS\,H} \tag{3.23}$$

La Section 3.2.4 fournit des détails sur le passage de la relation (3.22) à la relation (3.23).

- La loi de comportement du matériau en contraintes planes, développée dans la Section 3.2.1. Cette loi s'exprime de la même façon dans la bande comme dans la zone homogène :

$$\dot{\mathbf{N}}^{PS\,B} = \mathbf{L}^{PS\,B} : \mathbf{G}^{PS\,B} \quad ; \quad \dot{\mathbf{N}}^{PS\,H} = \mathbf{L}^{PS\,H} : \mathbf{G}^{PS\,H} \tag{3.24}$$

En utilisant l'équation (3.24), la relation d'équilibre (3.23) peut être exprimée en fonction des gradients de vitesse $\mathbf{G}^{PS\,B}$ et $\mathbf{G}^{PS\,H}$. Ainsi, la condition de compatibilité (3.21) peut être utilisée pour calculer le vecteur saut $\dot{\vec{\mathbf{C}}}^{PS}$

$$\left(\vec{\mathcal{N}}^{PS}.\mathbf{L}^{PS\,B}.\vec{\mathcal{N}}^{PS}\right).\dot{\vec{\mathbf{C}}}^{PS} = \vec{\mathcal{N}}^{PS}.\left[\left(\frac{e^{H}}{e^{B}}\mathbf{L}^{PS\,H} - \mathbf{L}^{PS\,B}\right) : \mathbf{G}^{PS\,H}\right] \tag{3.25}$$

La relation (3.25) indique que les composantes du vecteur saut $\dot{\vec{\mathbf{C}}}^{PS}$ deviennent très élevées lorsque le tenseur acoustique bidimensionnel tend vers une valeur singulière (i.e., lorsque son déterminant est proche de zéro)

$$\left\|\dot{\vec{\mathbf{C}}}^{PS}\right\| \to \infty \quad \Leftrightarrow \quad \det\left(\vec{\mathcal{N}}^{PS}.\mathbf{L}^{PSB}.\vec{\mathcal{N}}^{PS}\right) = 0 \tag{3.26}$$

Par ailleurs, lorsque les composantes de $\dot{\vec{\mathbf{C}}}^{PS}$ atteignent des valeurs élevées, les ratios G_{11}^{B}/G_{11}^{H} et G_{33}^{B}/G_{33}^{H} commencent à évoluer d'une manière exponentielle et peuvent atteindre des valeurs très élevées. En pratique, le déterminant du tenseur acoustique bidimensionnel dans la bande s'annule lorsque les composantes du gradient de vitesse $\mathbf{G}^{H}$ changent de signe. Cela entraîne une décharge élastique dans la zone homogène. Par conséquent, la localisation de la déformation est supposée atteinte lorsque la zone homogène ne subit plus aucune déformation plastique alors que la bande continue d'être sous chargement élastoplastique. Ainsi, l'annulation du déterminant de $\vec{\mathcal{N}}^{PS}.\mathbf{L}^{PSB}.\vec{\mathcal{N}}^{PS}$ est un bon indicateur de l'apparition de la striction localisée. Il faut mentionner que le même indicateur a été utilisé par Yoshida et Kuroda (2012).

Par ailleurs, lorsque l'imperfection géométrique initiale a une très faible valeur, e_0^B est pratiquement égal à e_0^H. Dans ce cas, il est raisonnable de supposer que juste avant la localisation de la déformation, les variables mécaniques dans la bande ont les mêmes évolutions que celles de la zone homogène. Par conséquent, l'équation (3.25) est approximativement équivalente à

$$\left(\vec{\mathcal{N}}^{PS}.\mathbf{L}^{PS\,B}.\vec{\mathcal{N}}^{PS}\right).\dot{\vec{\mathbf{C}}}^{PS} = \vec{\mathbf{0}} \tag{3.27}$$

En comparant l'équation (3.27) avec le critère de bifurcation de Rice exprimé dans la relation (3.16), on peut s'attendre à ce que les déformations limites prédites à travers l'approche M–K tendent vers celles du critère de bifurcation lorsque l'imperfection initiale ξ_0 (voir la relation $(3.19)_1$) tend vers zéro. Cette question sera discutée de manière approfondie dans la Section 3.5.1, à travers plusieurs résultats numériques.

3.2.4 Forme différentielle des équations d'équilibre

L'équation d'équilibre à l'interface de la bande et de la zone homogène est souvent exprimée en fonction des contraintes de Cauchy $\mathbf{\Sigma}^{PS\,B}$ et $\mathbf{\Sigma}^{PS\,H}$, des épaisseurs e^B et e^H et de la normale à la bande $\vec{\mathcal{N}}^{PS}$ (voir la relation (3.22)).

En vue d'établir une forme équivalente basée cette fois-ci sur les taux de contraintes nominales, nous allons préalablement démontrer la relation suivante :

$$\dot{\overline{\left(dS\,\mathbf{\Sigma}.\vec{\mathcal{N}}\right)}} = dS\,\vec{\mathcal{N}}.\dot{\mathbf{N}} \tag{3.28}$$

où dS est une surface élémentaire située à l'interface entre la bande et la zone homogène dans la configuration déformée.

Pour démontrer l'équation (3.28), nous utilisons la relation de Nanson. Cette dernière s'exprime sous la forme suivante :

$$dS\,\vec{\mathcal{N}} = dS_0\,J\,\mathbf{F}^{-T}.\vec{\mathcal{N}}_0 \tag{3.29}$$

où dS_0 est la surface élémentaire dans la configuration initiale, dont le transport dans la configuration déformée est dS, et J est le déterminant du gradient de transformation macroscopique $\mathbf{F}$.

En partant de l'équation (3.29), on peut aisément obtenir la relation suivante :

$$\dot{\overline{\left(dS\,\mathbf{\Sigma}.\vec{\mathcal{N}}\right)}} = \dot{\overline{\left(dS_0(J\,\mathbf{F}^{-T}.\vec{\mathcal{N}}_0).\mathbf{\Sigma}\right)}} = dS_0\left[\left(\dot{J}\,\mathbf{F}^{-T}.\vec{\mathcal{N}}_0\right).\mathbf{\Sigma} + \left(J\,\dot{\overline{\left(\mathbf{F}^{-T}\right)}}.\vec{\mathcal{N}}_0\right).\mathbf{\Sigma} + \left(J\,\mathbf{F}^{-T}.\vec{\mathcal{N}}_0\right).\dot{\mathbf{\Sigma}}\right] \tag{3.30}$$

Les dérivées temporelles de J et $\mathbf{F}^{-T}$ vérifient :

$$\begin{cases} \dot{J} = J\,\mathrm{Tr}(\mathbf{D}) \\ \dot{\overline{\left(\mathbf{F}^{-T}\right)}} = -\mathbf{F}^{-T}.\dot{\overline{\left(\mathbf{F}^{T}\right)}}.\mathbf{F}^{-T} = -\mathbf{F}^{-T}.\left(\mathbf{G}.\mathbf{F}\right)^{T}.\mathbf{F}^{-T} = -\mathbf{G}^{T}.\mathbf{F}^{-T} \end{cases} \tag{3.31}$$

En insérant la relation (3.31) dans l'équation (3.30) et en utilisant la relation de Nanson (3.29), on obtient :

$$\begin{aligned}\overline{\left(\mathrm{dS}\,\boldsymbol{\Sigma}.\vec{\mathcal{N}}\right)}^{\cdot} &= \mathrm{dS}\,\vec{\mathcal{N}}.\left(\boldsymbol{\Sigma}\,\mathrm{Tr}\left(\mathbf{D}\right)\right)-\left[\mathbf{G}^{\mathrm{T}}.\left(\mathrm{dS}\,\vec{\mathcal{N}}\right)\right].\boldsymbol{\Sigma}+\left(\mathrm{dS}\,\vec{\mathcal{N}}\right).\dot{\boldsymbol{\Sigma}}\\ &= \mathrm{dS}\,\vec{\mathcal{N}}.\left(\boldsymbol{\Sigma}\,\mathrm{Tr}\left(\mathbf{D}\right)-\mathbf{G}.\boldsymbol{\Sigma}+\dot{\boldsymbol{\Sigma}}\right)\\ &= \mathrm{dS}\,\vec{\mathcal{N}}.\dot{\mathbf{N}}\end{aligned} \tag{3.32}$$

Ce résultat démontre la relation (3.28).

Réciproquement, en partant de la relation (3.28), la forme différentielle de la relation d'équilibre (3.22) peut être exprimée sous la forme suivante :

$$\mathrm{dS}^{\mathrm{B}}\,\vec{\mathcal{N}}^{\mathrm{PS}}.\dot{\mathbf{N}}^{\mathrm{PS\,B}} = \mathrm{dS}^{\mathrm{H}}\,\vec{\mathcal{N}}^{\mathrm{PS}}.\dot{\mathbf{N}}^{\mathrm{PS\,H}} \tag{3.33}$$

où dS^{B} (respectivement dS^{H}) est égal à un élément de largeur à la frontière entre la bande et la zone homogène multiplié par l'épaisseur e^{B} (respectivement e^{H}). Cet élément de largeur étant situé à l'interface de la bande et de la zone homogène, il en résulte que l'équation (3.33) se simplifie sous la forme suivante :

$$\mathrm{e}^{\mathrm{B}}\,\vec{\mathcal{N}}^{\mathrm{PS}}.\dot{\mathbf{N}}^{\mathrm{PS\,B}} = \mathrm{e}^{\mathrm{H}}\,\vec{\mathcal{N}}^{\mathrm{PS}}.\dot{\mathbf{N}}^{\mathrm{PS\,H}} \tag{3.34}$$

Ainsi, on obtient exactement la relation (3.23).

L'équation (3.34) est la forme différentielle finale qui sera utilisée dans le cadre de l'approche M–K. Pour le cas de la théorie de bifurcation, nous rappelons que l'épaisseur de la bande reste la même que celle de la zone homogène tout au long de la déformation (avant l'annulation du déterminant du tenseur acoustique). Par conséquent, la forme différentielle de la relation d'équilibre se réduit à la relation ci-dessous, équivalente à l'équation (3.11)

$$\vec{\mathcal{N}}^{\mathrm{PS}}.\dot{\mathbf{N}}^{\mathrm{PS\,B}} = \vec{\mathcal{N}}^{\mathrm{PS}}.\dot{\mathbf{N}}^{\mathrm{PS\,H}} \tag{3.35}$$

3.3 Intégration numérique

3.3.1 Adaptation du problème mécanique à l'état de contraintes planes

Les critères de localisation que nous abordons dans cette étude sont développés sous l'hypothèse des contraintes planes, impliquant un formalisme bidimensionnel, comme évoqué précédemment. Nous allons donc détailler quelques aspects algorithmiques essentiels à l'implantation numérique de ces critères. Nous nous intéressons au cas particulier des matériaux à structure cristallographique orthotrope, où le gradient de vitesse macroscopique $\mathbf{G}$ et le taux de contrainte nominale macroscopique $\dot{\mathbf{N}}$ peuvent être mis sous la forme générique suivante :

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & 0 \\ G_{21} & G_{22} & 0 \\ 0 & 0 & ? \end{pmatrix} \quad ; \quad \dot{\mathbf{N}} = \begin{pmatrix} ? & ? & 0 \\ ? & ? & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.36}$$

Les composantes représentées par le caractère ? sont *a priori* inconnues et doivent être déterminées. À cette fin, la procédure suivante, basée sur la méthode itérative du point fixe, est utilisée.

- Étape 0 :

  - Initialiser le compteur d'itérations à 0.

  - Initialiser la composante G_{33} du gradient de vitesse $\mathbf{G}$ comme suit :

$$G_{33}^{(0)} = -\left(G_{11} + G_{22}\right) \tag{3.37}$$

  En effet, la déformation élastique est négligeable devant la déformation plastique et la partie plastique de la déformation est incompressible. Le choix (3.37) peut donc être considéré comme une bonne estimation de G_{33} à la première itération.

Pour s≥1, il faut valider les étapes suivantes :

- Étape 1 : Calculer $\mathbf{L}^{(s-1)}$ (l'itération (s–1) du module tangent macroscopique $\mathbf{L}$) en utilisant le modèle micromécanique décrit à la Section 2.3.2. La principale donnée d'entrée de cet algorithme multi-échelles est $\mathbf{G}^{(s-1)}$.
- Étape 2 : Calculer $G_{33}^{(s)}$ en utilisant la forme itérative de l'équation (3.8) :

$$G_{33}^{(s)} = -\frac{L_{33\gamma\delta}^{(s-1)}}{L_{3333}^{(s-1)}} G_{\gamma\delta}^{(s-1)} \quad ; \quad \gamma, \delta = 1, 2 \tag{3.38}$$

- Étape 3 : Si $\left(\dfrac{\left\| \mathbf{G}^{(s)} - \mathbf{G}^{(s-1)} \right\|_{L_2}}{\left\| \mathbf{G}^{(s)} \right\|_{L_2}} \right)$ est supérieur à 10^{-3}, alors le compteur d'itérations doit être mis à jour (s←s+1) et l'Étape 1 est exécutée à nouveau. Sinon, la valeur de G_{33} à l'itération courante ($G_{33}^{(s)}$) correspond à la composante recherchée du gradient de vitesse et satisfait l'état de contraintes planes. Dans ce cas, $\mathbf{L}^{PS}$ est déduit de $\mathbf{L}^{(s-1)}$ en utilisant les relations (3.9) et (3.10).

3.3.2 Approche par bifurcation

Pour prédire les CLF, des trajets de déformation ρ sont appliqués à la tôle sous l'état de contraintes planes. Avant l'apparition de la localisation, le matériau est supposé homogène et, par conséquent, aucune différence n'existe entre la bande et la zone homogène. Dans ce cas, le gradient de vitesse tridimensionnel $\mathbf{G}$ est par évidence homogène dans toute la tôle (aucune distinction n'est alors faite entre $\mathbf{G}^{H}$ et $\mathbf{G}^{B}$). Les conditions aux limites mixtes de l'équation (3.36) sont appliquées en considérant la condition supplémentaire suivante sur les composantes de $\mathbf{G}$:

$$G_{22} = \rho\, G_{11} \quad ; \quad G_{12} = G_{21} = 0 \tag{3.39}$$

Le trajet de déformation ρ est maintenu fixe durant le chargement.

Le comportement mécanique du matériau étant supposé indépendant de la vitesse de déformation, G_{11} peut alors être choisi arbitrairement. Par souci de simplicité, nous lui affectons la valeur 1. Il s'ensuit que la composante E_{11} $(= \int G_{11}\, dt)$ de la déformation logarithmique est égale au temps total imposé t.

L'algorithme de prédiction des CLF, basé sur l'approche par bifurcation, repose sur deux boucles imbriquées :

- Pour chaque trajet ρ allant de −0.5 à 1 (avec un pas d'incrémentation typique de 0.1).
  - Pour chaque incrément de temps $I^{\Delta} = [t_0, t_0 + \Delta t]$:
    - ✓ Calculer le module tangent bidimensionnel $\mathbf{L}^{PS}$ en utilisant le schéma itératif de la Section 3.3.1.
    - ✓ Pour chaque orientation θ allant de $0°$ à $90°$ (avec un pas d'incrémentation angulaire typique de 1.5°) :

      - Calculer le tenseur acoustique $\vec{\mathcal{N}}^{PS}.\mathbf{L}^{PS}.\vec{\mathcal{N}}^{PS}$. Nous rappelons que le vecteur $\vec{\mathcal{N}}^{PS}$ est égal à $(\cos\theta, \sin\theta)$.

      - Déterminer l'angle correspondant au vecteur normal $\vec{\mathcal{N}}^{PS}_{min}$ minimisant $\det\left(\vec{\mathcal{N}}^{PS}.\mathbf{L}^{PS}.\vec{\mathcal{N}}^{PS}\right)$ sur l'ensemble des valeurs de θ.
    - ✓ Si $\det\left(\vec{\mathcal{N}}_{min}.\mathbf{L}^{PS}.\vec{\mathcal{N}}_{min}\right) \leq 0$, alors la striction localisée est atteinte. L'angle θ correspondant représente l'orientation de la bande de localisation, et la déformation logarithmique suivant la direction de laminage E_{11} est la déformation limite prédite. On arrête alors le calcul. Sinon, on reprend le processus itératif à l'incrément suivant.

Il faut noter que le domaine de variation de l'orientation de la bande de localisation est restreint à l'intervalle [0°, 90°] en raison de la symétrie du tenseur acoustique $\vec{\mathcal{N}}^{PS}.\mathbf{L}^{PS}.\vec{\mathcal{N}}^{PS}$ par rapport au vecteur normal $\vec{\mathcal{N}}^{PS}$, d'une part, et des propriétés orthotropes de la tôle, d'autre part. Dans la Section 3.5.1, nous démontrerons que les composantes de cisaillement du module tangent sont réduites de manière significative, surtout durant la transition entre la phase purement élastique et la phase élastoplastique. Comme cela a été mentionné précédemment, cette réduction est due à la formation de points de vertex sur la surface de charge du monocristal. Par conséquent, le déterminant du tenseur acoustique a une évolution similaire aux composantes de cisaillement, et finit par s'annuler à des niveaux réalistes de déformation logarithmique.

3.3.3 Approche par imperfection initiale

Avec l'approche M–K, les conditions aux limites mixtes appliquées à la zone homogène sont les mêmes que celles de l'approche par bifurcation (voir la Section 3.3.2). La prédiction de CLF par l'approche M−K repose sur trois boucles imbriquées :

- Pour chaque trajet de chargement ρ allant de –0.5 à 1 (avec un pas d'incrémentation typique de 0.1).
  - Pour chaque pas de temps $I^{\Delta} = [t_0, t_0 + \Delta t]$, utiliser l'algorithme de la Section 3.3.1 pour intégrer les équations constitutives à l'échelle de l'agrégat polycristallin représentatif de la zone homogène sous condition de contraintes planes. Dans cette zone, le gradient de vitesse tridimensionnel $\mathbf{G}^{H}$ vérifie les mêmes conditions aux limites que celles relatives à l'approche par bifurcation (voir la Section 3.3.2 pour plus de détails). Par conséquent, $G^{H}_{22} = \rho\, G^{H}_{11}$ et $G^{H}_{12} = G^{H}_{21} = 0$. Les autres composantes sont déterminées par la condition de contraintes planes (3.36). Par ailleurs, les valeurs du gradient de vitesse macroscopique bidimensionnel $\mathbf{G}^{PS\,H}$, de la composante hors-plan du gradient de vitesse G^{H}_{33} et du taux de contrainte nominale bidimensionnel $\dot{\mathbf{N}}^{PS\,H}$, calculées à l'instant $t_0 + \Delta t$, sont sauvegardées. En effet, ces valeurs seront utilisées plus tard pour actualiser l'imperfection géométrique ξ, de même que les composantes du gradient de vitesse bidimensionnel $\mathbf{G}^{PS\,B}$. Ces dernières doivent vérifier à la fois la relation d'équilibre et la condition de compatibilité à l'interface entre la bande et la zone homogène.
    L'intégration incrémentale des relations constitutives du polycristal représentatif de la zone homogène est effectuée jusqu'à ce que la déformation logarithmique E^{H}_{11} atteint 1.
  - Pour chaque orientation θ_0 de la bande allant de 0° à 90° (avec un pas d'incrémentation typique de 1.5°).
    - Pour chaque incrément de temps $I^{\Delta} = [t_0, t_0 + \Delta t]$ (pour des raisons de simplicité et de commodité, les pas de temps utilisés pour intégrer les relations constitutives dans la bande sont les mêmes que ceux utilisés pour intégrer les relations constitutives dans la zone homogène) :
      - Utiliser $\mathbf{G}^{PS\,H}$, G^{H}_{33} et $\dot{\mathbf{N}}^{PS\,H}$ (calculés à l'instant final $t_0 + \Delta t$) pour déterminer $\mathbf{G}^{PS\,B}$, G^{B}_{33} et $\mathbf{L}^{PSB}$. Par souci de clarté, la description détaillée des sous-étapes nécessaires au calcul de ces différentes variables est présentée dans une autre section (Section 3.3.4).
      - Vérifier la condition suivante :

$$\det\left(\vec{\mathcal{N}}^{PS} . \mathbf{L}^{PS\,B} . \vec{\mathcal{N}}^{PS}\right) \leq 0 \qquad (3.40)$$

Si la condition (3.40) est satisfaite, alors la déformation logarithmique courante E_{11}^{H} est considérée comme déformation critique correspondant à l'orientation initiale θ_0. Cette dernière est notée E_{11}^{*}. Le calcul est donc arrêté. Si au contraire la condition (3.40) n'est pas satisfaite, alors on passe à l'incrément suivant.

- Pour un trajet de déformation ρ donné, nous considérons parmi les différentes orientations θ_0 (allant de 0° à 90°), celle qui minimise la déformation critique E_{11}^{*} comme étant l'orientation initiale de la bande de localisation. Cette valeur est notée θ_0^L et la valeur correspondante dans la configuration courante est notée θ^L. Par ailleurs, le minimum E_{11} des déformations critiques représente la déformation limite obtenue.

3.3.4 Calcul de $\mathbf{G}^{PS\,B}$, G_{33}^{B} et $\mathbf{L}^{B}$

Dans cette section, les équations qui régissent le critère de Marciniak–Kuczynski sont combinées avec la relation (3.8) (caractérisant l'état de contraintes planes) afin de déterminer, à l'instant final $t_0+\Delta t$, le gradient de vitesse bidimensionnel dans la bande $\mathbf{G}^{PS\,B}$, la composante hors-plan G_{33}^{B} et enfin le module tangent macroscopique $\mathbf{L}^{B}$. Par souci d'allègement des notations, nous omettrons d'introduire l'argument $t_0+\Delta t$ dans les équations qui suivent. Ainsi, sauf mention contraire, toutes les variables exprimées sans argument font référence à l'instant final. Il faut souligner que le gradient de vitesse bidimensionnel de la zone homogène $\mathbf{G}^{PS\,H}$ ainsi que le taux de contrainte nominale associé $\dot{\mathbf{N}}^{PS\,H}$ sont supposés connus (en effet, les valeurs de ces variables sont sauvegardées durant l'exécution de l'algorithme détaillé à la Section 3.3.3). Nous rappelons brièvement les principales équations sur lesquelles repose l'approche M–K :

- Les relations (3.8) et (3.10) appliquées au polycristal représentatif de la bande.
- La condition de compatibilité (3.21).
- La loi d'équilibre locale à l'interface entre la zone homogène et la bande (Eq. (3.23)). Cette dernière est équivalente à

$$\vec{\mathcal{N}}^{PS}.\dot{\mathbf{N}}^{PS\,B} - (1/f)\,\vec{\mathcal{N}}^{PS}.\dot{\mathbf{N}}^{PS\,H} = \vec{\mathbf{0}} \tag{3.41}$$

où le rapport des épaisseurs f est défini par

$$f = \frac{e^{B}}{e^{H}} = \frac{e_0^{B}}{e_0^{H}} \exp\left(E_{33}^{B} - E_{33}^{H}\right) = f_0 \exp\left(E_{33}^{B} - E_{33}^{H}\right) \tag{3.42}$$

Nous pouvons remarquer que le rapport des épaisseurs f (respectivement f_0) est relié à l'imperfection courante ξ (respectivement initiale ξ_0), introduite dans l'équation (3.19), par la relation suivante :

$$f = 1 - \xi \quad ; \quad f_0 = 1 - \xi_0 \tag{3.43}$$

Ces équations décrivant l'approche M–K sont résolues par la méthode itérative de Newton–Raphson. Pour déterminer la matrice jacobienne nécessaire pour l'application de la méthode de Newton–Raphson sous une forme simplifiée, les équations relatives à l'approche M–K sont exprimées dans un repère local $\left(\vec{\mathcal{N}}, \vec{\mathcal{T}}, \vec{\mathbf{x}}_3\right)$ lié à la bande (voir Fig. 3.4).

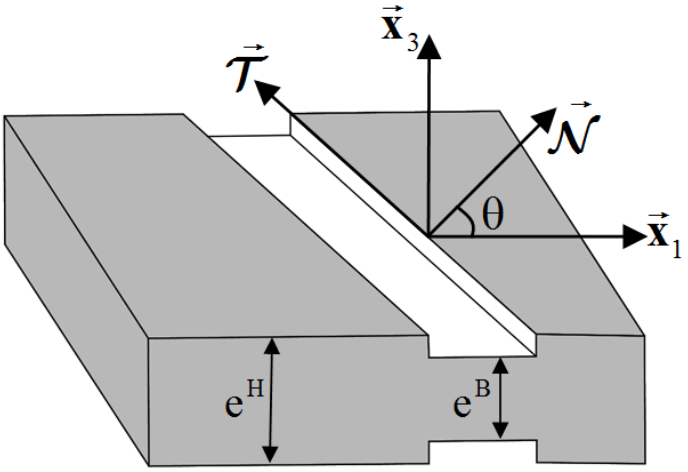


Fig. 3.4. Illustration du repère local $\left(\vec{\mathcal{N}}, \vec{\mathcal{T}}, \vec{\mathbf{x}}_3\right)$ lié à la bande dans la tôle.

La matrice de rotation $\mathbf{R}^\theta$ définissant l'orientation du repère local $\left(\vec{\mathcal{N}}, \vec{\mathcal{T}}, \vec{\mathbf{x}}_3\right)$ par rapport au repère du laboratoire $\left(\vec{\mathbf{x}}_1, \vec{\mathbf{x}}_2, \vec{\mathbf{x}}_3\right)$ s'exprime sous la forme suivante :

$$\mathbf{R}^\theta = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{3.44}$$

Par ailleurs, nous désignerons par $\underset{\sim}{T}$ les composantes du tenseur $\mathbf{T}$ exprimées dans le repère local $\left(\vec{\mathcal{N}}, \vec{\mathcal{T}}, \vec{\mathbf{x}}_3\right)$. Lorsque $\mathbf{T}$ est un tenseur d'ordre 1 (un vecteur), nous avons la relation d'équivalence suivante entre ses composantes exprimées dans le repère local et celles exprimées dans le repère du laboratoire :

$$\forall\, m = 1,2,3: \quad \begin{cases} \underset{\sim}{T}_m = R^\theta_{pm}\, T_p \\ T_m = R^\theta_{mp}\, \underset{\sim}{T}_p \end{cases} \quad ; \quad p = 1,2,3 \tag{3.45}$$

Lorsque $\mathbf{T}$ est un tenseur d'ordre 2, on a :

$$\forall\, m,n = 1,2,3: \quad \begin{cases} \underset{\sim}{T}_{mn} = R^\theta_{pm} T_{pq} R^\theta_{qn} \\ T_{mn} = R^\theta_{mp}\, \underset{\sim}{T}_{pq} R^\theta_{nq} \end{cases} \quad ; \quad p,q = 1,2,3 \tag{3.46}$$

Lorsque $\mathbf{T}$ est plutôt un tenseur d'ordre 4, on obtient :

$$\forall\ m,n,p,q=1,2,3:\quad \begin{cases} \underset{\sim}{T}_{mnpq}=T_{ijkl}R^{\theta}_{im}R^{\theta}_{jn}R^{\theta}_{kp}R^{\theta}_{lq} \\ T_{mnpq}=\underset{\sim}{T}_{ijkl}R^{\theta}_{mi}R^{\theta}_{nj}R^{\theta}_{pk}R^{\theta}_{ql} \end{cases} \quad ;\quad i,j,k,l=1,2,3 \tag{3.47}$$

Dans le repère local lié à la bande, le vecteur normal $\vec{\mathcal{N}}^{PS}$ est égal à (1,0). Ainsi, en considérant la relation de compatibilité (3.21), les composantes de $\underset{\sim}{\mathbf{G}}^{PS\,B}$ peuvent se mettre sous la forme suivante :

$$\underset{\sim}{\mathbf{G}}^{PS\,B}=\begin{pmatrix} \underset{\sim}{G}^{H}_{11}+\dot{\underset{\sim}{C}}_{1} & \underset{\sim}{G}^{H}_{12} \\ \underset{\sim}{G}^{H}_{21}+\dot{\underset{\sim}{C}}_{2} & \underset{\sim}{G}^{H}_{22} \end{pmatrix} \quad ;\quad \underset{\sim}{\mathbf{G}}^{PS\,H}=\begin{pmatrix} \underset{\sim}{G}^{H}_{11} & \underset{\sim}{G}^{H}_{12} \\ \underset{\sim}{G}^{H}_{21} & \underset{\sim}{G}^{H}_{22} \end{pmatrix} \tag{3.48}$$

Comme on peut le remarquer, les deux composantes inconnues du gradient de vitesse bidimensionnel de la bande dans le repère local, à savoir $\underset{\sim}{G}^{B}_{11}$ et $\underset{\sim}{G}^{B}_{21}$, sont indépendantes. Par conséquent, ces dernières peuvent être choisies comme inconnues du problème, à la place des variables $\dot{\underset{\sim}{C}}_{1}$ et $\dot{\underset{\sim}{C}}_{2}$.

De plus, la relation d'équilibre (3.41) peut s'écrire sous la forme simplifiée suivante dans le repère local :

$$\begin{cases} \dot{\underset{\sim}{N}}^{PS\,B}_{11}-(1/f)\,\dot{\underset{\sim}{N}}^{PS\,H}_{11}=0 \\ \dot{\underset{\sim}{N}}^{PS\,B}_{12}-(1/f)\,\dot{\underset{\sim}{N}}^{PS\,H}_{12}=0 \end{cases} \tag{3.49}$$

Nous rappelons que :

$$\dot{\underset{\sim}{N}}^{PS\,B}_{11}=\dot{\underset{\sim}{N}}^{B}_{11}\quad ;\quad \dot{\underset{\sim}{N}}^{PS\,H}_{11}=\dot{\underset{\sim}{N}}^{H}_{11}\quad ;\quad \dot{\underset{\sim}{N}}^{PS\,B}_{12}=\dot{\underset{\sim}{N}}^{B}_{12}\quad ;\quad \dot{\underset{\sim}{N}}^{PS\,H}_{12}=\dot{\underset{\sim}{N}}^{H}_{12} \tag{3.50}$$

Il en résulte que l'équation (3.49) est équivalente à la relation suivante :

$$\begin{cases} \dot{\underset{\sim}{N}}^{B}_{11}-(1/f)\,\dot{\underset{\sim}{N}}^{H}_{11}=0 \\ \dot{\underset{\sim}{N}}^{B}_{12}-(1/f)\,\dot{\underset{\sim}{N}}^{H}_{12}=0 \end{cases} \tag{3.51}$$

Sous l'hypothèse des contraintes planes, $\dot{\underset{\sim}{\mathbf{N}}}^{PS\,B}$ est exprimé en fonction du module tangent bidimensionnel $\underset{\sim}{\mathbf{L}}^{PS\,B}$ ainsi que du gradient de vitesse $\underset{\sim}{\mathbf{G}}^{PS\,B}$ (voir la relation (3.10)) :

$$\forall\,\alpha,\beta=1,2:\quad \dot{\underset{\sim}{N}}^{B}_{\alpha\beta}=\underset{\sim}{L}^{PSB}_{\alpha\beta\gamma\delta}\,\underset{\sim}{G}^{B}_{\gamma\delta}\quad ;\quad \gamma,\delta=1,2 \tag{3.52}$$

Ainsi, en utilisant les équations $(3.48)_1$ et (3.52), les relations d'équilibre (3.49) ou (3.51) peuvent se réécrire sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \underset{\sim}{L}^{PSB}_{1111}\,\underset{\sim}{G}^{B}_{11}+\underset{\sim}{L}^{PSB}_{1112}\,\underset{\sim}{G}^{H}_{12}+\underset{\sim}{L}^{PSB}_{1121}\,\underset{\sim}{G}^{B}_{21}+\underset{\sim}{L}^{PSB}_{1122}\,\underset{\sim}{G}^{H}_{22}-(1/f)\dot{\underset{\sim}{N}}^{H}_{11}=0 \\ \underset{\sim}{L}^{PSB}_{1211}\,\underset{\sim}{G}^{B}_{11}+\underset{\sim}{L}^{PSB}_{1212}\,\underset{\sim}{G}^{H}_{12}+\underset{\sim}{L}^{PSB}_{1221}\,\underset{\sim}{G}^{B}_{21}+\underset{\sim}{L}^{PSB}_{1222}\,\underset{\sim}{G}^{H}_{22}-(1/f)\dot{\underset{\sim}{N}}^{H}_{12}=0 \end{cases} \tag{3.53}$$

De plus, la condition ci-dessous doit être vérifiée si l'on veut s'assurer que la tôle est soumise à des déformations beaucoup plus importantes dans la bande que dans la zone homogène

$$\left|\underset{\sim}{G}^{B}_{33}\right|\geq\left|\underset{\sim}{G}^{H}_{33}\right|\quad\Leftrightarrow\quad \underset{\sim}{G}^{B}_{33}\leq\underset{\sim}{G}^{H}_{33} \tag{3.54}$$

La relation (3.54) peut être exprimée de manière équivalente sous la forme

$$\Lambda^{2}+\underset{\sim}{G}^{B}_{33}-\underset{\sim}{G}^{H}_{33}=0\quad ;\quad \Lambda\in\mathbb{R} \tag{3.55}$$

Dans le repère local, la composante hors-plan du gradient de vitesse de la bande $\underset{\sim}{G}^{B}_{33}$ est exprimée en fonction des composantes planes, en utilisant une relation équivalente à l'équation (3.8) :

$$\underset{\sim}{G}^{B}_{33} = -\frac{\underset{\sim}{L}^{B}_{33\gamma\delta}}{\underset{\sim}{L}^{B}_{3333}} \underset{\sim}{G}^{B}_{\gamma\delta} \quad ; \quad \gamma,\delta = 1,2 \tag{3.56}$$

Le système global d'équations que nous avons à résoudre se présente comme suit :

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad ; \quad \begin{cases} R_1 = \underset{\sim}{L}^{PSB}_{1111} \underset{\sim}{G}^{B}_{11} + \underset{\sim}{L}^{PSB}_{1112} \underset{\sim}{G}^{H}_{12} + \underset{\sim}{L}^{PSB}_{1121} \underset{\sim}{G}^{B}_{21} + \underset{\sim}{L}^{PSB}_{1122} \underset{\sim}{G}^{H}_{22} - (1/f)\dot{\underset{\sim}{N}}^{H}_{11} \\ R_2 = \underset{\sim}{L}^{PSB}_{1211} \underset{\sim}{G}^{B}_{11} + \underset{\sim}{L}^{PSB}_{1212} \underset{\sim}{G}^{H}_{12} + \underset{\sim}{L}^{PSB}_{1221} \underset{\sim}{G}^{B}_{21} + \underset{\sim}{L}^{PSB}_{1222} \underset{\sim}{G}^{H}_{22} - (1/f)\dot{\underset{\sim}{N}}^{H}_{12} \\ R_3 = \Lambda^2 - \frac{\underset{\sim}{L}^{B}_{3311}}{\underset{\sim}{L}^{B}_{3333}} \underset{\sim}{G}^{B}_{11} - \frac{\underset{\sim}{L}^{B}_{3312}}{\underset{\sim}{L}^{B}_{3333}} \underset{\sim}{G}^{H}_{12} - \frac{\underset{\sim}{L}^{B}_{3321}}{\underset{\sim}{L}^{B}_{3333}} \underset{\sim}{G}^{B}_{21} - \frac{\underset{\sim}{L}^{B}_{3322}}{\underset{\sim}{L}^{B}_{3333}} \underset{\sim}{G}^{H}_{22} - \underset{\sim}{G}^{H}_{33} \end{cases} \tag{3.57}$$

Le vecteur résidu $\mathbf{R}$ est fortement non-linéaire (en effet les composantes du module tangent ainsi que le rapport des épaisseurs sont fonctions des composantes des gradients de vitesse $\underset{\sim}{\mathbf{G}}^{B}$ et $\underset{\sim}{\mathbf{G}}^{H}$) et a pour principale inconnue le vecteur $\underset{\sim}{\mathbf{G}}^{B}_{S} = \left(\underset{\sim}{G}^{B}_{11}, \underset{\sim}{G}^{B}_{21}, \Lambda\right)$. La méthode itérative de Newton–Raphson est utilisée pour résoudre ce système d'équations. Ainsi, $\mathbf{R}$ est approximé par une série de Taylor développée à l'ordre 1 au voisinage de $\underset{\sim}{\mathbf{G}}^{B}_{S}$

$$\mathbf{R}(\underset{\sim}{\mathbf{G}}^{B}_{S} + \delta\underset{\sim}{\mathbf{G}}^{B}_{S}) = \mathbf{R}(\underset{\sim}{\mathbf{G}}^{B}_{S}) + \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \underset{\sim}{\mathbf{G}}^{B}_{S}} . \delta\underset{\sim}{\mathbf{G}}^{B}_{S} = \mathbf{0} \tag{3.58}$$

L'expression analytique de la matrice jacobienne vaut

$$\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \underset{\sim}{\mathbf{G}}^{B}_{S}} = \begin{pmatrix} \underset{\sim}{L}^{PSB}_{1111} - \frac{\partial(1/f)}{\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{11}} \dot{\underset{\sim}{N}}^{H}_{11} & \underset{\sim}{L}^{PSB}_{1121} - \frac{\partial(1/f)}{\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{21}} \dot{\underset{\sim}{N}}^{H}_{11} & 0 \\ \underset{\sim}{L}^{PSB}_{1211} - \frac{\partial(1/f)}{\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{11}} \dot{\underset{\sim}{N}}^{H}_{12} & \underset{\sim}{L}^{PSB}_{1221} - \frac{\partial(1/f)}{\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{21}} \dot{\underset{\sim}{N}}^{H}_{12} & 0 \\ -\frac{\underset{\sim}{L}^{B}_{3311}}{\underset{\sim}{L}^{B}_{3333}} & -\frac{\underset{\sim}{L}^{B}_{3321}}{\underset{\sim}{L}^{B}_{3333}} & 2\Lambda \end{pmatrix} \tag{3.59}$$

Pour une détermination complète de cette matrice jacobienne, les dérivées $\partial(1/f)/\partial\underset{\sim}{G}^{B}_{11}$ et $\partial(1/f)/\partial\underset{\sim}{G}^{B}_{21}$ doivent être calculées. À cette fin, l'équation (3.42) est exprimée de manière équivalente sous la forme

$$f = f_0 \exp\left(\underset{\sim}{E}^{B}_{33}(t_0) + \Delta t \underset{\sim}{G}^{B}_{33} - \underset{\sim}{E}^{H}_{33}\right) = f_0 \exp\left(E^{B}_{33}(t_0) + \Delta t \underset{\sim}{G}^{B}_{33} - E^{H}_{33}\right) \tag{3.60}$$

où $E^{B}_{33}(t_0)$ est la composante 33 du tenseur de déformation logarithmique dans la bande au début de l'incrément de temps imposé I^{Δ}, et E^{H}_{33} est la composante 33 du tenseur de déformation logarithmique dans la zone homogène à la fin du pas de temps. Par conséquent, nous pouvons approximer E^{H}_{33} par $E^{H}_{33}(t_0) + \Delta t G^{H}_{33}$. Par ailleurs, on peut noter que f ne dépend pas explicitement de $\underset{\sim}{G}^{B}_{11}$ et $\underset{\sim}{G}^{B}_{21}$. Cependant, f dépend de $\underset{\sim}{G}^{B}_{33}$, qui à son tour dépend de $\underset{\sim}{G}^{B}_{11}$ et $\underset{\sim}{G}^{B}_{21}$. Ainsi, $\partial(1/f)/\partial\underset{\sim}{G}^{B}_{11}$ et $\partial(1/f)/\partial\underset{\sim}{G}^{B}_{21}$ peuvent être déterminés comme suit :

$$\frac{\partial(1/f)}{\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{11}} = \frac{\partial(1/f)}{\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{33}} \frac{\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{33}}{\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{11}} \quad ; \quad \frac{\partial(1/f)}{\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{21}} = \frac{\partial(1/f)}{\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{33}} \frac{\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{33}}{\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{21}} \tag{3.61}$$

En utilisant l'équation (3.60), $\partial(1/f)/\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{33}$ peut être exprimé sous la forme

$$\frac{\partial(1/f)}{\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{33}} = -\frac{\Delta t}{f} \tag{3.62}$$

En outre, grâce à la relation (3.56), $\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{33} / \partial \underset{\sim}{G}^{B}_{11}$ et $\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{33} / \partial \underset{\sim}{G}^{B}_{21}$ sont exprimés sous la forme

$$\frac{\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{33}}{\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{11}} = -\frac{\underset{\sim}{L}^{B}_{3311}}{\underset{\sim}{L}^{B}_{3333}} \quad ; \quad \frac{\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{33}}{\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{21}} = -\frac{\underset{\sim}{L}^{B}_{3321}}{\underset{\sim}{L}^{B}_{3333}} \tag{3.63}$$

Par suite, les expressions analytiques de $\partial(1/f) / \partial \underset{\sim}{G}^{B}_{11}$ et $\partial(1/f) / \partial \underset{\sim}{G}^{B}_{21}$ sont respectivement

$$\frac{\partial(1/f)}{\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{11}} = \frac{\Delta t}{f} \frac{\underset{\sim}{L}^{B}_{3311}}{\underset{\sim}{L}^{B}_{3333}} \quad ; \quad \frac{\partial(1/f)}{\partial \underset{\sim}{G}^{B}_{21}} = \frac{\Delta t}{f} \frac{\underset{\sim}{L}^{B}_{3321}}{\underset{\sim}{L}^{B}_{3333}} \tag{3.64}$$

En insérant la relation (3.64) dans l'équation (3.59), la matrice jacobienne du système peut être complètement déterminée, de même que la direction de descente $\delta \underset{\sim}{\mathbf{G}}^{B}_{S}$:

$$\delta \underset{\sim}{\mathbf{G}}^{B}_{S} = -\left[\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \underset{\sim}{\mathbf{G}}^{B}_{s}} \right]^{-1} . \mathbf{R}(\underset{\sim}{\mathbf{G}}^{B}_{S}) \tag{3.65}$$

Nous rappelons que les valeurs de $\mathbf{G}^{PS\,H}$, G^{H}_{33} et $\dot{\mathbf{N}}^{PS\,H}$ sont connues à la fin du pas de temps imposé $I^{\Delta} = [t_0, t_0 + \Delta t]$, comme mentionné au début de cette section. En définitive, l'algorithme d'intégration des différentes relations sur lesquelles repose l'approche M–K se décompose en quatre étapes principales (Étape 1→4). L'indice k fait référence à l'itération courante de la méthode de Newton–Raphson :

- Étape 0 :

  - Calculer l'orientation de la bande θ à $t_0 + \Delta t$ en utilisant la relation (3.20).

  - Exprimer les tenseurs $\mathbf{G}^{PS\,H}$ et $\dot{\mathbf{N}}^{PS\,H}$ dans le repère local lié à la bande (voir l'équation (3.45)). Quant à G^{H}_{33}, sa valeur reste inchangée par rotation $\mathbf{R}^{\theta}$. On obtient donc $\underset{\sim}{G}^{H}_{33} = G^{H}_{33}$.

  - Initialiser le compteur d'itérations k à 0.

  - Initialiser $\mathbf{G}^{B(0)}$, $\mathbf{L}^{B(0)}$ et $\mathbf{L}^{PS\,B(0)}$ aux dernières valeurs calculées de $\mathbf{G}^{B}$, $\mathbf{L}^{B}$ et $\mathbf{L}^{PS\,B}$ (i.e., à la convergence sur l'incrément précédent).

Pour k ≥1, suivre les étapes suivantes :

- Étape 1 :

  - Exprimer $\mathbf{G}^{B\,(k-1)}$, $\mathbf{L}^{B\,(k-1)}$ et $\mathbf{L}^{PS\,B\,(k-1)}$ dans le repère local lié à la bande en utilisant les relations (3.45) et (3.47).

- Calculer le rapport $f^{(k-1)}$ de l'épaisseur de la bande par rapport à celui de la zone homogène :

$$f^{(k-1)} = f_0 \exp\left(E_{33}^{B}(t_0) + \Delta t\, \underset{\sim}{G}_{33}^{B(k-1)} - E_{33}^{H}\right) \tag{3.66}$$

- Étape 2 :

  - Introduire $\underset{\sim}{\mathbf{G}}^{PS\,H}$, $\underset{\sim}{G}_{33}^{H}$, $\underset{\sim}{\dot{\mathbf{N}}}^{PS\,H}$, $f^{(k-1)}$, $\underset{\sim}{\mathbf{L}}^{B\,(k-1)}$ et $\underset{\sim}{\mathbf{L}}^{PS\,B\,(k-1)}$ dans la relation (3.57) (respectivement les relations (3.59) et (3.64)) pour calculer le vecteur résidu $\mathbf{R}(\underset{\sim}{\mathbf{G}}_S^{B(k-1)})$ (respectivement le matrice jacobienne du système $\partial \mathbf{R}(\underset{\sim}{\mathbf{G}}_S^{B(k-1)}) / \partial \underset{\sim}{\mathbf{G}}_S^{B}$).

  - Calculer $\delta \underset{\sim}{\mathbf{G}}_S^{B(k-1)} = \left(\delta \underset{\sim}{G}_{11}^{B(k-1)}, \delta \underset{\sim}{G}_{21}^{B(k-1)}, \delta\Lambda\right) = -\left[\dfrac{\partial \mathbf{R}(\underset{\sim}{\mathbf{G}}_S^{B(k-1)})}{\partial \underset{\sim}{\mathbf{G}}_S^{B}}\right]^{-1} .\mathbf{R}(\underset{\sim}{\mathbf{G}}_S^{B(k-1)})$ (voir la relation (3.65) ci-dessus).

- Étape 3 :

  - Actualiser les composantes planes de $\underset{\sim}{\mathbf{G}}^{B\,(k)}$: $\underset{\sim}{\mathbf{G}}^{PS\,B\,(k)} = \begin{pmatrix} \underset{\sim}{G}_{11}^{B\,(k-1)} + \delta \underset{\sim}{G}_{11}^{B\,(k-1)} & \underset{\sim}{G}_{12}^{H} \\ \underset{\sim}{G}_{21}^{B\,(k-1)} + \delta \underset{\sim}{G}_{21}^{B\,(k-1)} & \underset{\sim}{G}_{22}^{H} \end{pmatrix}$

  - Actualiser la composante hors-plan $\underset{\sim}{G}_{33}^{B\,(k)}$ de $\underset{\sim}{\mathbf{G}}^{B\,(k)}$: $\underset{\sim}{G}_{33}^{B\,(k)} = -\dfrac{\underset{\sim}{L}_{33\gamma\delta}^{B\,(k-1)}}{\underset{\sim}{L}_{3333}^{B(k-1)}} \underset{\sim}{G}_{\gamma\delta}^{B\,(k)}$; $\gamma, \delta = 1,2$

- Étape 4 :

  - Exprimer $\underset{\sim}{\mathbf{G}}^{B\,(k)}$ dans le repère du laboratoire $\left(\vec{\mathbf{x}}_1, \vec{\mathbf{x}}_2, \vec{\mathbf{x}}_3\right)$.

  - En choisissant $\mathbf{G}^{B\,(k)}$ comme nouveau gradient de vitesse dans la bande, utiliser l'algorithme développé dans la Section 3.3.1 pour calculer $\mathbf{L}^{B\,(k)}$ et $\dot{\mathbf{N}}^{B\,(k)}$.

  - Vérifier si le critère de convergence suivant est satisfait :

$$\frac{\left\|\mathbf{G}^{B\,(k)} - \mathbf{G}^{B\,(k-1)}\right\|_{L_2}}{\left\|\mathbf{G}^{B\,(k)}\right\|_{L_2}} + \frac{\left\|\dot{\mathbf{N}}^{B\,(k)} - \dot{\mathbf{N}}^{B\,(k-1)}\right\|_{L_2}}{\left\|\dot{\mathbf{N}}^{B\,(k)}\right\|_{L_2}} \leq 10^{-3} \tag{3.67}$$

  Si la condition (3.67) est vérifiée, alors la convergence est atteinte. On arrête alors le processus itératif. Sinon, on actualise le compteur d'itérations (k←k+1) et on reprend le processus itératif à partir de l'Étape 1.

Par rapport à l'algorithme présenté, quelques remarques et indications peuvent être formulées :

- Pour des incréments de temps typiques Δt d'une valeur inférieure ou égale à 10^{-3} s, l'algorithme converge au bout de 5 itérations au plus.
- Le critère de convergence (3.67) est utilisé à la place du critère classique

$$\frac{\left\|\mathbf{G}^{B\,(k)} - \mathbf{G}^{B\,(k-1)}\right\|_{L_2}}{\left\|\mathbf{G}^{B\,(k)}\right\|_{L_2}} \leq 10^{-3} \tag{3.68}$$

afin d'éviter des variations importantes du module tangent $\mathbf{L}^{B}$ d'un incrément à l'autre. En effet, quelques simulations effectuées ont démontré que des valeurs voisines de $\mathbf{G}^{B(k)}$ et $\mathbf{G}^{B(k-1)}$ n'impliquent pas forcément que $\dot{\mathbf{N}}^{B(k)}$ soit proche de $\dot{\mathbf{N}}^{B(k-1)}$. Ce constat motive l'utilisation du critère de convergence (3.67), qui est beaucoup plus rigoureux que celui de la relation (3.68).

3.4 Analyse de la localisation de la déformation de bicouches métal/élastomère

Afin d'améliorer la formabilité des tôles métalliques, plusieurs solutions technologiques ont vu le jour et sont utilisées dans divers domaines industriels. Une des solutions courantes consiste à adhérer parfaitement un revêtement en élastomère à la tôle métallique initiale. Cette technique a prouvé son efficacité en matière d'amélioration de la formabilité des composants industriels (Chiu et al., 1994 ; Alaca et al., 2002 ; Xue et Hutchinson, 2007 ; Xue et Hutchinson, 2008). En effet, pour ne citer que quelques exemples, on note l'utilisation croissante de bicouches métal/élastomère dans la fabrication de pièces électroniques qui sont généralement soumises à de fortes déformations lors de leurs mises en service. Les bicouches sont également utilisées dans la fabrication de conducteurs extensibles employés dans des applications biomédicales, de même que la fabrication de systèmes de transfert pour les circuits intégrés à forte densité (Chui et al., 1994 ; Hommel et Kraft, 2001). L'approche par bifurcation et celle par imperfection initiale, précédemment développées dans les Sections 3.2 et 3.3 pour le cas des tôles métalliques, sont étendues dans la présente section au cas des bicouches. Dans cette étude, nous supposons que l'adhérence entre les deux couches reste parfaite durant le chargement. Par souci de clarté, tous les paramètres et variables mécaniques correspondant à la couche de métal (respectivement la couche d'élastomère) sont référencés par la lettre M (respectivement E). À titre d'illustration, $\mathbf{\Sigma}_E$ désigne le tenseur des contraintes de Cauchy de l'élastomère. Avant d'aborder les modèles de prédiction de ductilité des bicouches, nous présentons le modèle utilisé pour modéliser le comportement de l'élastomère. Contrairement à la couche métallique (pour laquelle les différentes relations constitutives ont été détaillées au Chapitre 2), le modèle de comportement mécanique de l'élastomère est de type phénoménologique et il est modélisé par la loi de Néo-Hooke (Hunter, 1979). Cette loi permet de relier le tenseur des contraintes de Cauchy $\mathbf{\Sigma}_E$ au tenseur des déformations de Cauchy–Green gauche $\mathbf{V}_E$ par la relation suivante :

$$\mathbf{\Sigma}_E = q\,\mathbf{I}_2 + \mu_E\,(\mathbf{V}_E)^2 \tag{3.69}$$

où μ_E est le module de cisaillement de l'élastomère, et q la pression hydrostatique déterminée par la condition d'incompressibilité. Par ailleurs, le tenseur $\mathbf{V}_E$ est défini par la relation suivante :

$$(\mathbf{V}_E)^2 = \mathbf{F}_E.(\mathbf{F}_E)^T \tag{3.70}$$

$\mathbf{F}_E$ étant le gradient de transformation relatif à la couche d'élastomère.

3.4.1 Approche par bifurcation

Similairement au cas de la couche métallique discuté précédemment (voir la Section 3.2.2), la bicouche est soumise à un chargement biaxial dans son plan, où les composantes planes du gradient de vitesse dans les deux couches sont définies par les relations suivantes :

$$\begin{aligned} &G_{M11} = G_{E11} = G_{11} = 1 \quad ; \quad G_{M22} = G_{E22} = G_{22} = \rho \\ &G_{M12} = G_{M21} = G_{E12} = G_{E21} = G_{12} = G_{21} = 0 \end{aligned} \tag{3.71}$$

Nous rappelons que ρ définit le paramètre de trajet de déformation variant entre -0.5 (traction uniaxiale) et 1 (expansion equibiaxiale). Par ailleurs, nous maintenons la condition de contraintes planes. Cette condition aux limites implique que le gradient de vitesse de chacune des couches et le taux de contrainte nominale associé vérifient la relation (3.36). La composante G_{M33} de la couche métallique est déterminée itérativement par l'algorithme décrit dans la Section 3.3.1. Quant à la couche d'élastomère, sa déformation est incompressible, et par conséquent la composante G_{E33} est obtenue de manière directe via la relation $G_{E33} = -(G_{E11} + G_{E22})$. Une fois le gradient de vitesse de l'élastomère calculé, on en déduit le gradient de transformation associé $\mathbf{F}_E$, puis on intègre les relations constitutives de l'élastomère qui se résument aux équations (3.69) et (3.70). Le critère de bifurcation stipule que la localisation de la déformation survient lorsque le tenseur acoustique relatif à la bicouche devient singulier. Ainsi, ce critère, précédemment exprimé par la relation (3.17) pour une tôle métallique simple, s'exprime pour la bicouche sous la forme suivante :

$$\det\left(\vec{\mathcal{N}}^{PS}.\mathbf{L}^{PS}_{M/E}.\vec{\mathcal{N}}^{PS}\right) = 0 \tag{3.72}$$

où $\mathbf{L}^{PS}_{M/E}$ est une sorte de moyenne des modules tangents bidimensionnels de la couche du métal et de celle de l'élastomère. Ce module tangent est exprimé sous la forme suivante :

$$\mathbf{L}^{PS}_{M/E} = \frac{e_M\,\mathbf{L}^{PS}_M + e_E\,\mathbf{L}^{PS}_E}{e_M + e_E} \tag{3.73}$$

où e_M (respectivement e_E) est l'épaisseur initiale de la couche de métal (respectivement de la couche d'élastomère) et $\mathbf{L}^{PS}_M$ (respectivement $\mathbf{L}^{PS}_E$) est le module tangent bidimensionnel de la couche de métal (respectivement de la couche d'élastomère). Nous rappelons que pour la couche de métal, $\mathbf{L}^{PS}_M$ est déduit du module tangent tridimensionnel $\mathbf{L}_M$ par la relation de condensation suivante :

$$\forall \alpha,\beta,\gamma,\delta = 1,2: \quad L^{PS}_{M\alpha\beta\gamma\delta} = L_{M\alpha\beta\gamma\delta} - \frac{L_{M\alpha\beta33}\,L_{M33\gamma\delta}}{L_{M3333}} \tag{3.74}$$

D'autre part, $\mathbf{L}_E^{PS}$ vérifie la relation ci-dessous (Ben Bettaieb et Abed-Meraim, 2015) :

$$\mathbf{L}_E^{PS} = \boldsymbol{\mathcal{L}}_E + \boldsymbol{\Sigma}_E \otimes \mathbf{I}_2 - {}^1\boldsymbol{\Lambda}(\boldsymbol{\Sigma}_E) - {}^2\boldsymbol{\Lambda}(\boldsymbol{\Sigma}_E) \tag{3.75}$$

où les tenseurs ${}^1\boldsymbol{\Lambda}$ et ${}^2\boldsymbol{\Lambda}$ représentent les termes convectifs (du tenseur des contraintes de Cauchy) liés aux grandes déformations :

$$\begin{aligned} {}^1\Lambda_{ijkl}(\boldsymbol{\Sigma}_E) &= \frac{1}{2}(\delta_{lj}\Sigma_{E\,ik} - \delta_{kj}\Sigma_{il}) \\ {}^2\Lambda_{ijkl}(\boldsymbol{\Sigma}_E) &= \frac{1}{2}(\delta_{ik}\Sigma_{E\,lj} + \delta_{il}\Sigma_{E\,kj}) \end{aligned} \tag{3.76}$$

Les composantes non nulles du tenseur d'ordre 4 $\boldsymbol{\mathcal{L}}_E$ se définissent comme suit :

$$\begin{cases} \mathcal{L}_{E\,1111} = 2\mu_E\left[\exp(2E_{11}) + \exp[-2(E_{11} + E_{22})]\right] \\ \mathcal{L}_{E\,2222} = 2\mu_E\left[\exp(2E_{22}) + \exp[-2(E_{11} + E_{22})]\right] \\ \mathcal{L}_{E\,1122} = 2\mu_E \exp[-2(E_{11} + E_{22})] \\ \mathcal{L}_{E\,1212} = \dfrac{\mu_E}{2}\left[\exp(2E_{11}) + \exp(2E_{22})\right] \end{cases} \tag{3.77}$$

Le critère de bifurcation relatif aux bicouches est implanté suivant une procédure numérique similaire à l'algorithme développé dans la Section 3.3.2 (et qui correspond au cas des tôles métalliques).

3.4.2 Approche par imperfection initiale

En vue de présenter l'extension du modèle de Marciniak–Kuczynski au cas des bicouches, nous adoptons les notations suivantes :

- e_M^B : épaisseur initiale de la couche de métal dans la bande.
- e_M^H : épaisseur initiale de la couche de métal dans la zone homogène.
- e_E^B : épaisseur initiale de l'élastomère dans la bande.
- e_E^H : épaisseur initiale de l'élastomère dans la zone homogène (égale à e_E^B).

En considérant ces différentes notations, l'imperfection géométrique initiale ξ_0 (correspondant uniquement à la couche de métal), peut être définie comme suit :

$$\xi_0 = 1 - \frac{e_M^B}{e_M^H} \tag{3.78}$$

L'approche M–K relative à la bicouche est basée sur quatre relations principales :

- La première relation traduit l'adhérence entre la couche de métal et celle de l'élastomère. En effet, les gradients de vitesse bidimensionnels plans du métal et de l'élastomère sont les mêmes :

$$\mathbf{G}_M^{PS\,B} = \mathbf{G}_E^{PS\,B} = \mathbf{G}^{PS\,B} \quad ; \quad \mathbf{G}_M^{PS\,H} = \mathbf{G}_E^{PS\,H} = \mathbf{G}^{PS\,H} \tag{3.79}$$

- La seconde relation est la condition de compatibilité entre la bande et la zone homogène :

$$\mathbf{G}^{PSB} = \mathbf{G}^{PSH} + \dot{\vec{\mathbf{C}}}^{PS} \otimes \vec{\mathcal{N}}^{PS} \tag{3.80}$$

- La troisième relation est celle de la condition d'équilibre à l'interface entre la bande et la zone homogène :

$$\vec{\mathcal{N}}^{PS}.(e_M^B\ \dot{\mathbf{N}}_M^{PSB} + e_E^B\ \dot{\mathbf{N}}_E^{PSB}) = \vec{\mathcal{N}}^{PS}.(e_M^H\ \dot{\mathbf{N}}_M^{PSH} + e_E^H\ \dot{\mathbf{N}}_E^{PSH}) \tag{3.81}$$

- La quatrième relation fait référence aux lois de comportement relatives aux deux couches. Ces lois sont formulées sous l'hypothèse des contraintes planes et peuvent être exprimées sous les formes génériques suivantes :

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{N}}_M^{PSB} &= \mathbf{L}_M^{PSB} : \mathbf{G}^{PSB} \quad ; \quad \dot{\mathbf{N}}_E^{PSB} = \mathbf{L}_E^{PSB} : \mathbf{G}^{PSB} \\ \dot{\mathbf{N}}_M^{PSH} &= \mathbf{L}_M^{PSH} : \mathbf{G}^{PSH} \quad ; \quad \dot{\mathbf{N}}_E^{PSH} = \mathbf{L}_E^{PSH} : \mathbf{G}^{PSH} \end{aligned} \tag{3.82}$$

En insérant les relations constitutives (3.82) dans la condition d'équilibre (3.81), on peut obtenir la relation suivante :

$$\vec{\mathcal{N}}^{PS}.(e_M^B\ \mathbf{L}_M^{PSB} + e_E^B\ \mathbf{L}_E^{PSB}) : \mathbf{G}^{PSB} = \vec{\mathcal{N}}^{PS}.(e_M^H\ \mathbf{L}_M^{PSH} + e_E^H\ \mathbf{L}_E^{PSH}) : \mathbf{G}^{PSH} \tag{3.83}$$

Pour chaque trajet de déformation ρ et chaque orientation initiale de la bande θ_0, les relations principales sur lesquelles repose l'approche M–K sont intégrées de manière incrémentale. En effet, en analysant les relations (3.80) et (3.83), on peut remarquer que les principales inconnues du problème sont les deux composantes du vecteur saut $\dot{\vec{\mathbf{C}}}^{PS}$. Pour chaque chargement appliqué (déterminé par le trajet de déformation et l'orientation de la bande), les calculs sont arrêtés lorsque la norme du vecteur saut $\dot{\vec{\mathbf{C}}}^{PS}$ atteint une amplitude élevée, marquant ainsi la localisation de la déformation dans la bande.

3.5 Résultats numériques et discussions

3.5.1 Prédiction de la striction localisée dans les tôles métalliques

Dans cette section, nous présentons et discutons plusieurs résultats numériques relatifs à la prédiction de CLF de tôles métalliques. Ces résultats numériques ont été obtenus en couplant deux schémas de transition d'échelles (à savoir le schéma de Taylor–Lin et le schéma autocohérent, développés dans le chapitre 2) aux deux critères de localisation précédemment introduits (en l'occurrence le critère de bifurcation et l'analyse par imperfection géométrique initiale). Par souci de concision, le modèle autocohérent et le modèle de Taylor–Lin seront respectivement notés SC et FC. Pour établir des modèles de prédiction de ductilité, diverses combinaisons entre modèle de comportement et critère de localisation sont possibles : le modèle MK–FC fait référence à la combinaison entre l'approche M–K et le modèle FC ; le modèle MK–SC est la combinaison entre l'approche M–K et le modèle SC ; le modèle BT–FC est la combinaison entre l'approche par bifurcation et le modèle FC ; et enfin le modèle BT–SC désigne le couplage entre l'approche par bifurcation et le modèle SC. Dans les Sections 3.5.1.2–3.5.1.5, le critère classique de Schmid sera utilisé comme loi d'écoulement à l'échelle

du monocristal. Par ailleurs, l'effet de la régularisation de la loi de Schmid sur la forme et le niveau des CLF sera étudié en détails dans la Section 3.5.1.6.

3.5.1.1 Paramètres du matériau

À l'échelle du monocristal, les choix suivants sont adoptés pour toutes les simulations effectuées dans ce chapitre :

- La loi d'écrouissage introduite dans l'équation (1.20) sera utilisée sans prise en compte de l'effet d'anisotropie. En effet, toutes les composantes de la matrice d'interaction $\mathbf{a}$ sont fixées à 1.
- Les paramètres d'élasticité et d'écrouissage sont les mêmes que ceux donnés dans le Tab. 1.2.

L'agrégat polycristallin que nous considérons est composé de 2000 grains. Nous supposons que la texture cristallographique initiale du matériau est orthotrope (Fig. 3.5). Cette dernière a été générée en suivant la méthode proposée par Yoshida et Kuroda (2012).

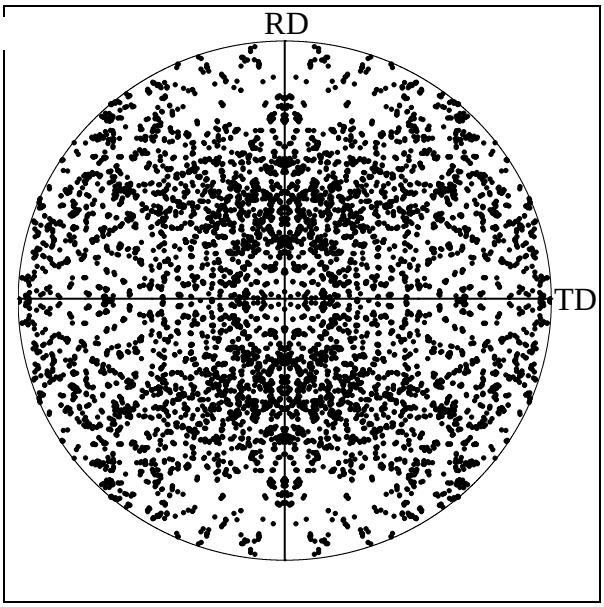


Fig. 3.5. Texture initiale de l'agrégat polycristallin étudié : figure de pôle de type {111}.

Nous supposons également que la forme initiale des différents grains constituant le polycristal est sphérique. Il faut rappeler que la morphologie du grain et son évolution influencent les propriétés macroscopiques du polycristal lorsque le modèle autocohérent est utilisé comme schéma de transition d'échelles (voir Section 2.4.6).

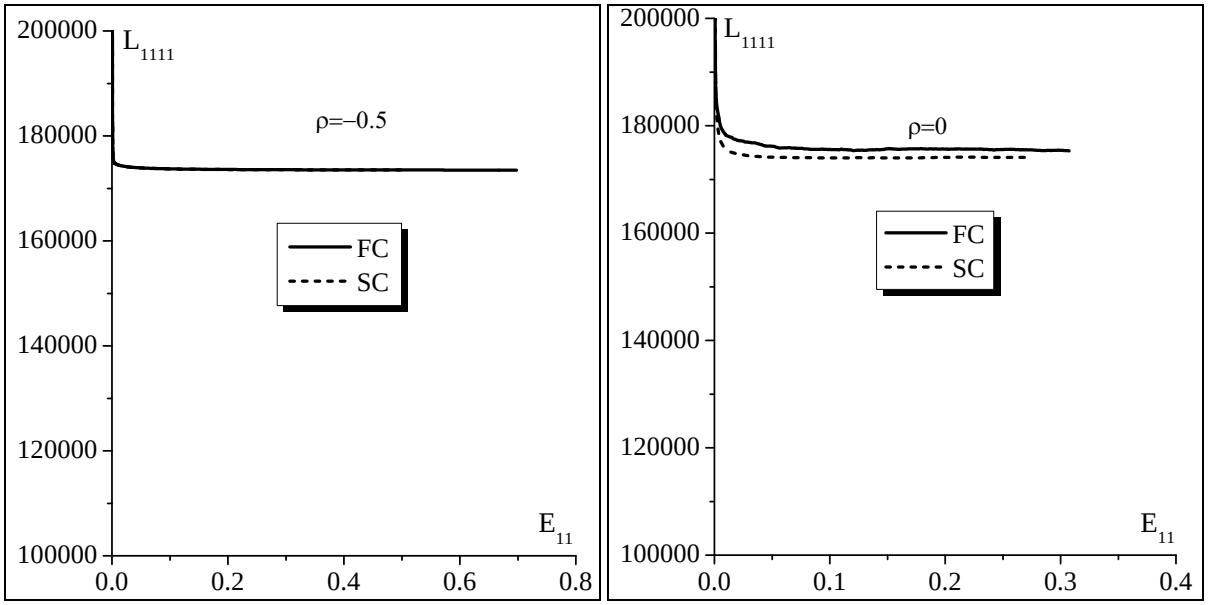
3.5.1.2 Prédiction de déformations limites par la théorie de bifurcation

Il est largement admis que le module tangent joue un rôle déterminant dans la prédiction des déformations limites par la théorie de bifurcation. Par conséquent, avant l'application du critère de bifurcation, nous examinerons l'évolution des composantes L_{1111} et L_{1212} du module tangent

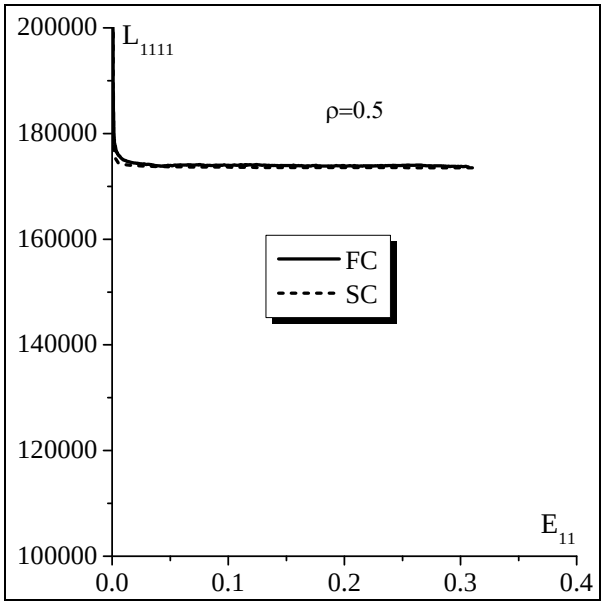
macroscopique (Fig. 3.6). La composante L_{1111} (respectivement L_{1212}) est représentative des composantes hors-cisaillement (respectivement de cisaillement) du module tangent. Dans les Fig. 3.6, quatre principaux trajets de déformation ($\rho = -0.5$, $\rho = 0$, $\rho = 0.5$, et $\rho = 1$) sont utilisés pour illustrer les évolutions de ces composantes. On peut aisément remarquer que l'évolution de la composante L_{1111} est pratiquement la même pour les deux schémas de transition d'échelles, en particulier pour le trajet de déformation correspondant à la traction uniaxiale ($\rho = -0.5$). Cependant, l'évolution de la composante de cisaillement L_{1212} diffère notablement d'un schéma de transition d'échelles à l'autre. Ce résultat confirme les différentes tendances observées dans le Chapitre 2.

On peut également observer à partir des Fig. 3.6 que, malgré la réduction de la composante L_{1111} durant le passage de la phase purement élastique à la phase élastoplastique, cette dernière garde une valeur sensiblement élevée (comprise notamment entre 1.7×10^5 et 1.8×10^5 MPa) tout au long de la déformation (indépendamment du trajet de déformation). Par contre, la composante de cisaillement L_{1212} est significativement réduite dans la phase élastoplastique et atteint des valeurs relativement faibles (par comparaison à la composante L_{1111}). Cette observation est une conséquence naturelle du mécanisme de glissement multiple caractérisant la plasticité cristalline, et qui se traduit naturellement par la présence de points de vertex sur la surface de charge de Schmid du monocristal. La réduction des composantes de cisaillement est le facteur déstabilisant qui est principalement responsable de la bifurcation, et entraîne ainsi une localisation de la déformation à des niveaux réalistes de déformation (Hutchinson, 1970 ; Yoshida et al., 2009). Une corrélation peut être établie entre l'évolution des composantes du module tangent et les déformations limites correspondantes prédites par la théorie de bifurcation. Comme le montre les Fig. 3.6, les composantes de cisaillement (du module tangent) obtenues avec le modèle autocohérent ont des niveaux beaucoup plus faibles que leurs homologues déterminées par le modèle de Taylor–Lin. Ainsi, les déformations limites déterminées par la combinaison de l'approche par bifurcation et du modèle autocohérent sont beaucoup plus faibles que celles obtenues lorsque le modèle de Taylor–Lin est utilisé comme schéma de transition d'échelles (voir les Fig. 3.7 et Fig. 3.8(a)). Il faut préciser que lorsqu'une surface de charge ne présentant pas de points de vertex est utilisée pour modéliser l'écoulement élastoplastique, la composante de cisaillement L_{1212} garde pratiquement la même valeur que les autres composantes, entrainant une prédiction des déformations limites à des niveaux très élevés. Par ailleurs, les différentes courbes des Fig. 3.6 (en particulier, celles correspondant aux composantes de cisaillement L_{1212}) montrent qu'avec le modèle FC, on observe des fluctuations, contrairement au modèle SC. Ce résultat s'explique par le cadre théorique des deux modèles de transition d'échelles. En effet, lorsque le modèle de Taylor–Lin est utilisé, les différents grains se déforment uniformément et les interactions entre les grains ne sont

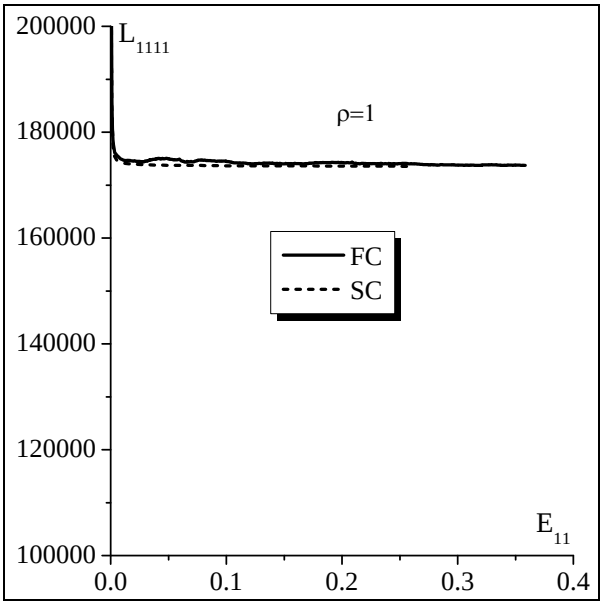
pas prises en compte. Il en résulte que le module tangent (respectivement le taux de contrainte nominale) varie significativement d'un grain à l'autre, suivant l'orientation du réseau cristallographique. Ce fort contraste conduit à un module tangent macroscopique dont les composantes sont discontinues, et par conséquent à un tenseur acoustique dont le déterminant présente de fortes fluctuations (voir la Fig. 3.7(a)). Nous rappelons que dans le cas du modèle de Taylor–Lin, le module tangent macroscopique n'est autre que la moyenne volumique des modules tangents microscopiques. Par contre, lorsque le modèle autocohérent est utilisé, les interactions entre les différents grains et leurs voisinages (gouvernées essentiellement par la relation d'équilibre) sont prises en compte. Ces interactions permettent de réduire le contraste observé sur les composantes des modules tangents entre les différents grains. Cela se traduit par une évolution beaucoup plus régulière du déterminant du tenseur acoustique (voir la Fig. 3.7). Il faut noter que des tendances similaires ont été observées par Franz et al. (2013).



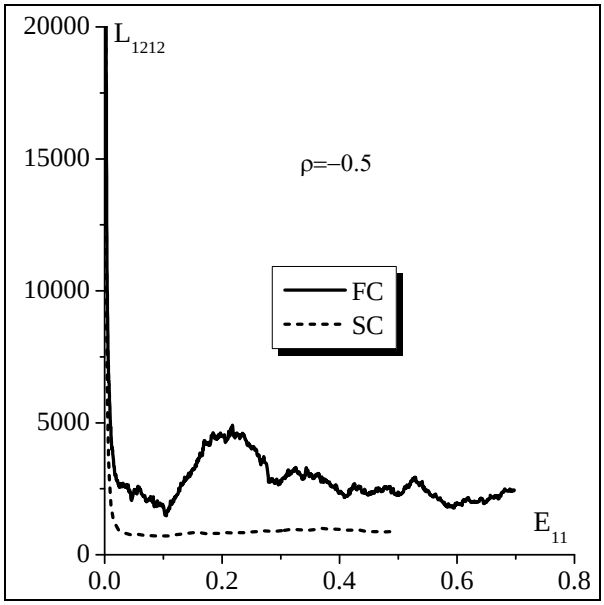
(a) (b)


200000
180000
160000
140000
120000
100000
L1111
ρ=0.5
FC
SC
E11
0.0
0.1
0.2
0.3
0.4

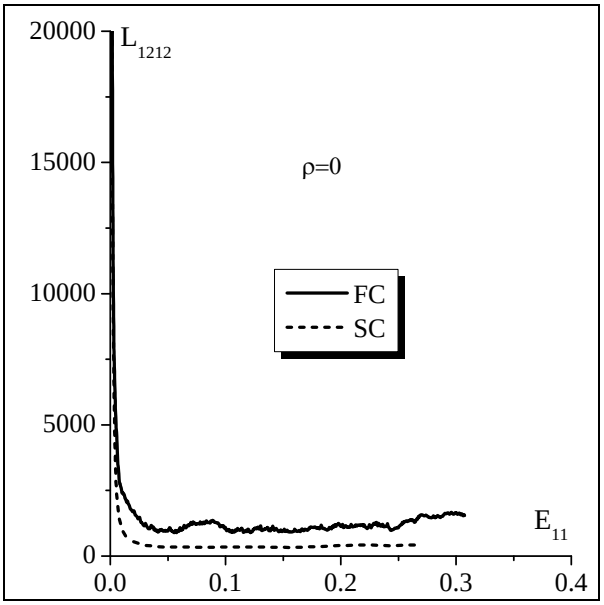
(c)


200000
180000
160000
140000
120000
100000
L1111
ρ=1
FC
SC
E11
0.0
0.1
0.2
0.3
0.4

(d)


20000
15000
10000
5000
0
L1212
ρ=–0.5
FC
SC
E11
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8

(e)


20000
15000
10000
5000
0
L1212
ρ=0
FC
SC
E11
0.0
0.1
0.2
0.3
0.4

(f)

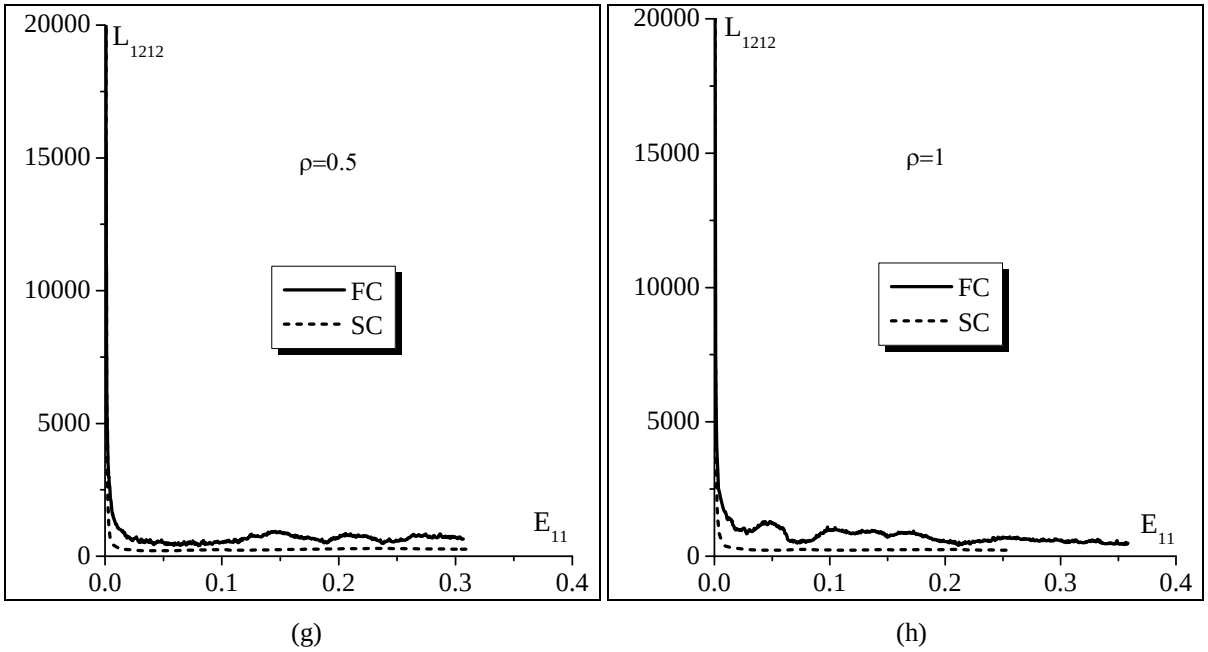


Fig. 3.6. Évolution des composantes L_{1111} et L_{1212} en fonction de E_{11} : (a) L_{1111} ($\rho = -0.5$) ; (b) L_{1111} ($\rho = 0$) ; (c) L_{1111} ($\rho = 0.5$) ; (d) L_{1111} ($\rho = 1$) ; (e) L_{1212} ($\rho = -0.5$) ; (f) L_{1212} ($\rho = 0$) ; (g) L_{1212} ($\rho = 0.5$) ; (h) L_{1212} ($\rho = 1$).

Les résultats numériques obtenus par application du critère de bifurcation sont présentés dans ce qui suit. L'application de ce critère se traduit par l'évaluation du signe du minimum du déterminant du tenseur acoustique par rapport à toutes les orientations potentielles de la bande de localisation. Lorsque le minimum du déterminant du tenseur acoustique est négatif, il y a localisation de la déformation. La forme bidimensionnelle de ce critère implique que le vecteur normal à la bande $\vec{\mathcal{N}}^{PS}$ est restreint au plan de la tôle durant la déformation.

Dans la Fig. 3.7, nous montrons l'évolution du minimum du déterminant du tenseur acoustique en fonction de la déformation majeure, pour quatre trajets de déformation différents ($\rho = -0.5$, $\rho = 0$, $\rho = 0.5$, et $\rho = 1$). Étant donné que le tenseur acoustique est défini positif dans la plage des déformations précédant l'apparition de la striction localisée, le vecteur normal à la bande de localisation $\vec{\mathcal{N}}^{PS}$, qui correspond à l'annulation du déterminant du tenseur acoustique au début de la localisation, est le même que celui qui minimise ce déterminant par rapport à tous les vecteurs normaux possibles. On peut observer, qu'indépendamment du trajet de déformation et du schéma d'homogénéisation, le minimum du déterminant décroit brutalement durant la transition entre le régime purement élastique et le régime élastoplastique. Dans la phase élastoplastique, on note cette fois-ci une réduction beaucoup plus douce du déterminant qui s'annule finalement dans le domaine des grandes déformations.

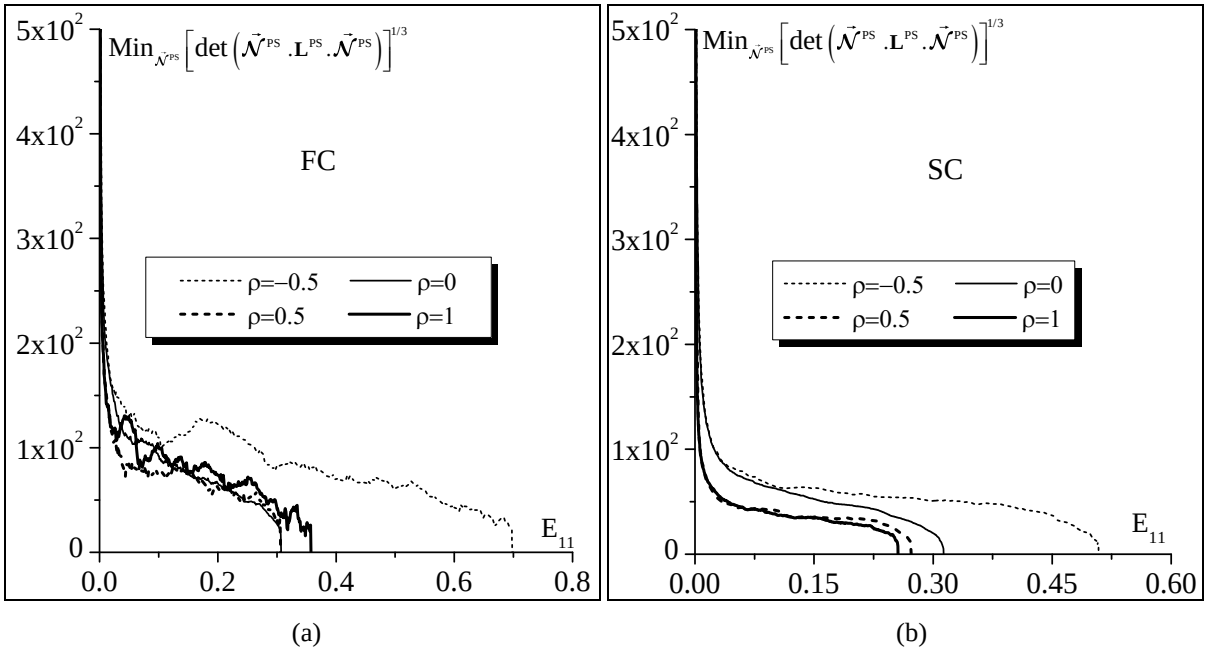
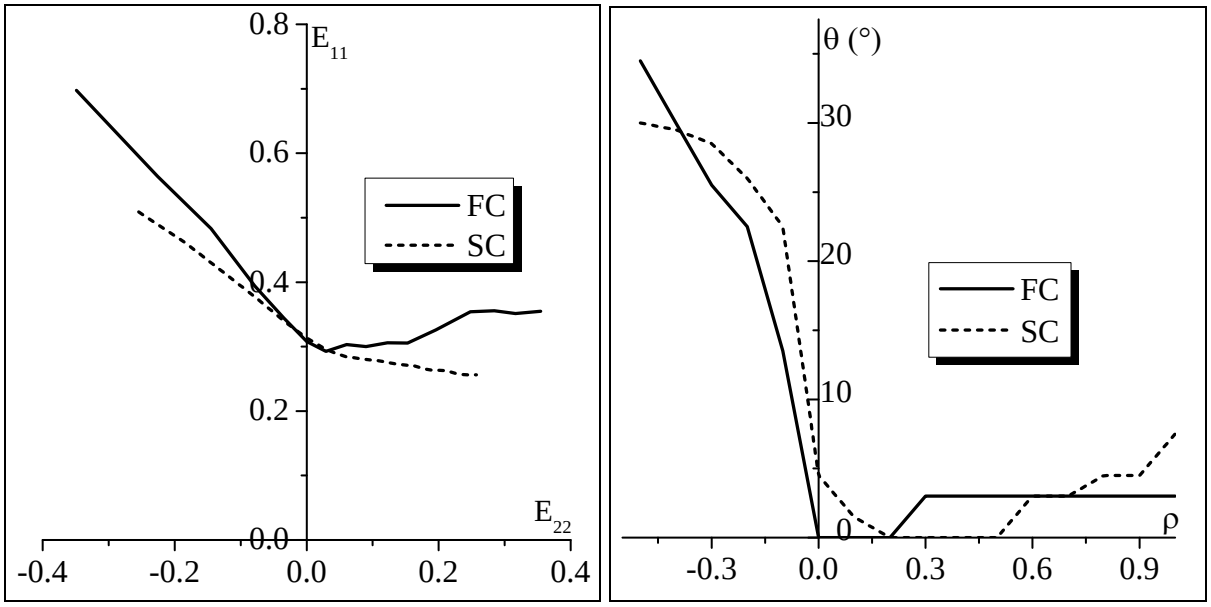


Fig. 3.7. Évolution du minimum du déterminant du tenseur acoustique en fonction de E_{11} pour quatre trajets de déformation différents ($\rho = -0.5$, $\rho = 0$, $\rho = 0.5$, et $\rho = 1$) : (a) modèle FC ; (b) modèle SC.

Les CLF prédites par le critère de bifurcation, en conjonction avec les modèles FC et SC, sont illustrées sur la Fig. 3.8(a). Cette figure met en lumière les différences majeures que l'on observe entre les deux modèles de transition d'échelles. En effet, les déformations limites prédites par le modèle FC sont globalement plus élevées que leurs homologues prédites par le modèle SC. Cette observation confirme les résultats récents de Franz et al. (2013). Par ailleurs, il faut remarquer que les déformations limites obtenues sont décroissantes et monotones dans l'intervalle des trajets de déformation négatifs ($\rho < 0$), et cela pour les deux modèles de transition d'échelles. Cependant, pour des trajets d'expansion biaxiale ($\rho \geq 0$), aussi bien la forme que le niveau des CLF prédites sont très sensibles au schéma de transition d'échelles utilisé. En effet, alors que les déformations limites obtenues avec le modèle SC restent monotones et décroissantes, celles du modèle FC sont croissantes pour des trajets de déformation appartenant à l'intervalle $[0.2, 0.7]$, et ensuite constantes pour des trajets de déformation supérieurs à 0.7. On peut également noter que les déformations limites obtenues avec les deux modèles de transition d'échelles sont très proches au voisinage du trajet correspondant à la traction plane ($\rho = 0$). En revanche, les écarts les plus significatifs entre les deux modèles d'homogénéisation sont obtenus respectivement au voisinage du trajet de déformation de la traction uniaxiale ($\rho = -0.5$), où l'écart relatif atteint 27.5%, et au voisinage de l'expansion équibiaxiale ($\rho = 1$), où l'écart relatif vaut 27.8%. Comparativement aux prédictions de CLF de Yoshida et Kuroda (2012), obtenues en utilisant un modèle de prédiction de ductilité de type BT–FC, la CLF prédite dans le cas présent a une forme similaire dans la gamme des trajets de déformation négatifs. Cependant, pour des trajets de déformation positifs, on observe des différences notables. Comme mentionné dans

plusieurs travaux de la littérature (voir par exemple, Barlat, 1987 ; Signorelli et al., 2009), l'extrême sensibilité de la partie droite des CLF (prédites) à la texture cristallographique initiale pourrait expliquer ces différences.

La Fig. 3.8(b) montre les différentes orientations θ de la bande de localisation en fonction du trajet de déformation ρ, pour les deux schémas de transition d'échelles utilisés. Même si de manière globale les courbes décrivant l'orientation de la bande de localisation ont des évolutions qualitativement comparables, on peut noter des différences quantitatives importantes par rapport aux deux schémas de transition d'échelles. Par ailleurs, on remarque que contrairement à la majorité des prédictions basées sur l'utilisation des modèles de comportement phénoménologiques, les bandes de localisation prédites par des modèles de comportement de type micromécanique ne sont pas forcément normales à la direction de laminage pour tous les trajets de déformation positifs. Cette tendance est confirmée par certains résultats de la littérature (Yoshida et Kuroda, 2012).



(a) (b)

Fig. 3.8. CLF et évolution de l'orientation de la bande de localisation, prédites par couplage des modèles FC et SC avec le critère de bifurcation : (a) CLF (b) Évolution de l'orientation de la bande de localisation en fonction du trajet de déformation.

Comme le suggère le Tab. 3.1, une corrélation existe entre le niveau des déformations limites prédites et le nombre moyen de systèmes actifs (désigné succinctement 'NMSA') dans le matériau polycristallin. En effet, les résultats du Tab. 3.1 montrent que les déformations limites augmentent avec le NMSA. Par exemple, lorsque le modèle FC est appliqué, la valeur maximale du NMSA est celle qui correspond au trajet $\rho = -0.5$, alors que la valeur minimale correspond au trajet $\rho = 0$. Les valeurs intermédiaires qui sont pratiquement identiques correspondent aux trajets $\rho = 0.5$ et $\rho = 1$. Par conséquent, l'évolution du NMSA suivant les différents trajets de déformation est cohérent avec

l'évolution du niveau des déformations limites associées (voir la Fig. 3.8(a)). Une tendance similaire est observée avec le modèle SC. En effet, on peut remarquer que le NMSA décroit de manière monotone lorsque ρ augmente (ce qui est aussi le cas du niveau des déformations limites correspondantes, tel qu'illustré dans la Fig. 3.8(a)). Nous précisons que les mêmes tendances ont été observées dans l'étude de Signorelli et al. (2009), où un schéma autocohérent viscoplastique a été couplé à l'approche M–K pour prédire les déformations limites de matériaux polycristallins à structure cristallographique de type CFC.

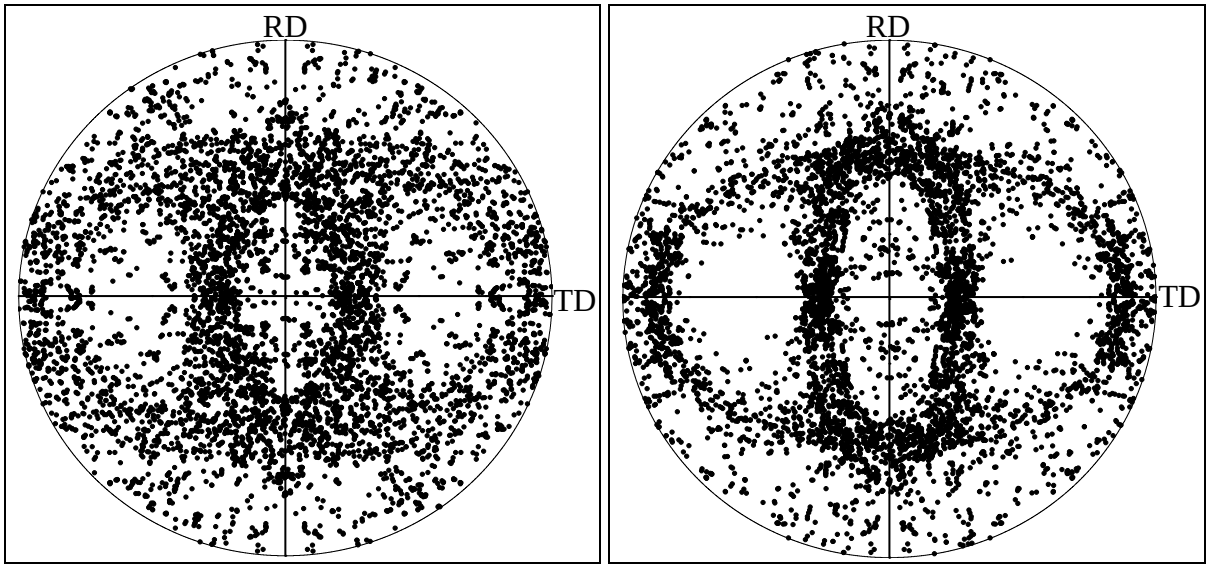
	$\rho = -0.5$	$\rho = 0$	$\rho = 0.5$	$\rho = 1$
NMSA déterminé par modèle FC	4.95	4.86	4.94	4.94
NMSA déterminé par le modèle SC	4.92	4.80	4.67	4.55

Tab. 3.1. Nombre Moyen des Systèmes Actifs (NMSA) déterminé en utilisant les deux schémas de transition d'échelles (pour quatre trajets de déformation représentatifs).

3.5.1.3 Prédiction des déformations limites par l'approche M–K

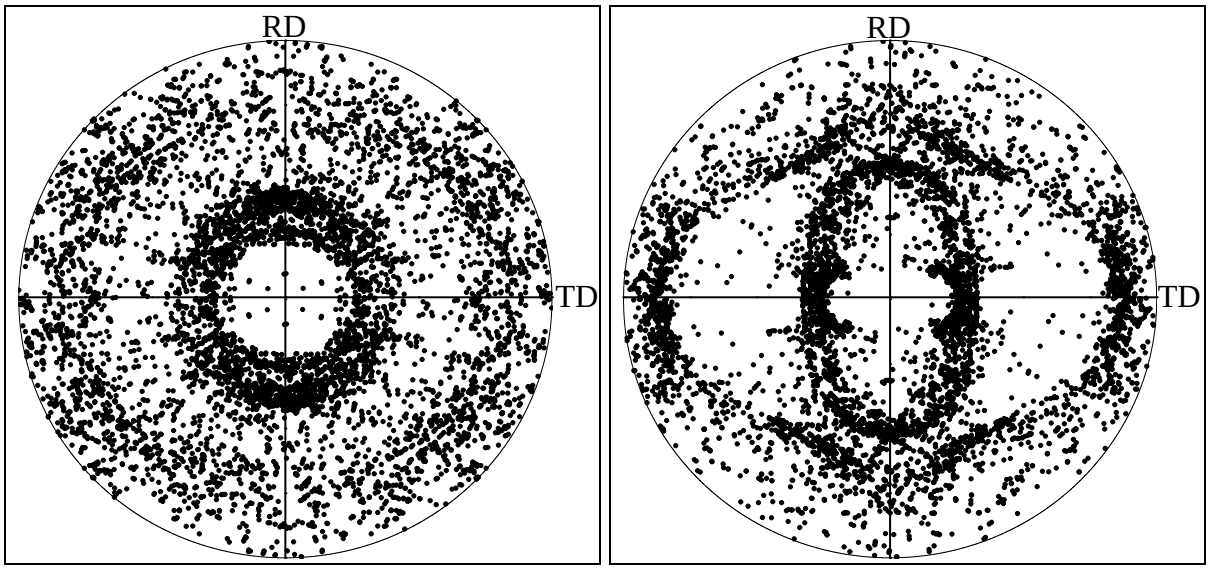
Dans cette section, l'approche de Marciniak et Kuczynski est utilisée pour prédire la limite de ductilité. La Fig. 3.9 montre les textures cristallographiques obtenues avec le modèle MK–FC dans les deux zones de la tôle (la bande et la zone homogène), déterminées lors de la simulation d'un essai de traction plane ($\rho = 0$). Pour mettre en lumière les différences observées entre les deux zones, l'intégration numérique est effectuée jusqu'à un niveau bien au-delà des déformations limites ($E^*_{11} = 0.25$), où les composantes de $\mathbf{G}^B$ sont extrêmement élevées par rapport aux composantes de $\mathbf{G}^H$ (qui deviennent infinitésimales). Ce point correspond à une déformation E^B_{11} égale à 0.6. Dans la zone homogène, la déformation logarithmique correspondante garde pratiquement la même valeur que la déformation limite (à cause des amplitudes très faibles des composantes de $\mathbf{G}^H$ au-delà de la localisation). Même si les deux textures sont toutes deux typiques d'une texture obtenue suite à une traction plane, elles sont clairement distinctes. En effet, la texture relative au polycristal représentatif de la bande (voir la Fig. 3.9(b)), qui est caractérisée par un gradient de vitesse à très forte amplitude, est naturellement plus marquée que celle relative à la zone homogène (voir la Fig. 3.9(a)). Des tendances similaires ont déjà été observées dans l'étude de Serenelli et al. (2010), où le comportement mécanique microscopique utilisé est supposé rigide viscoplastique. Sur la Fig. 3.10, les textures cristallographiques obtenues suite à l'application d'un essai d'expansion équibiaxiale ($\rho = 1$) sont présentées. On peut noter que, contrairement aux composantes de $\mathbf{G}^H$, qui correspondent bien à des conditions aux limites d'expansion équibiaxiale, les composantes de $\mathbf{G}^B$ tendent vers des conditions aux limites en traction plane pour des états de déformation de post-localisation. Ainsi, la texture prédite dans la zone homogène est une texture typique d'expansion équibiaxiale, alors que la texture

relative à la bande tend vers une texture de traction plane. Cette tendance est concordante avec de nombreux résultats de la littérature, qui indiquent qu'indépendamment des conditions aux limites imposées dans la zone homogène, la déformation que subit la bande tend vers une déformation de type traction plane, lorsqu'on s'approche de la localisation. Les évolutions des composantes du gradient de vitesse dans la bande $\mathbf{G}^{B}$, normalisées par la composante G_{11}^{B}, et correspondant aux deux trajets de déformation précédemment mentionnés (à savoir $\rho = 0$ et $\rho = 1$) sont illustrées sur la Fig. 3.11.



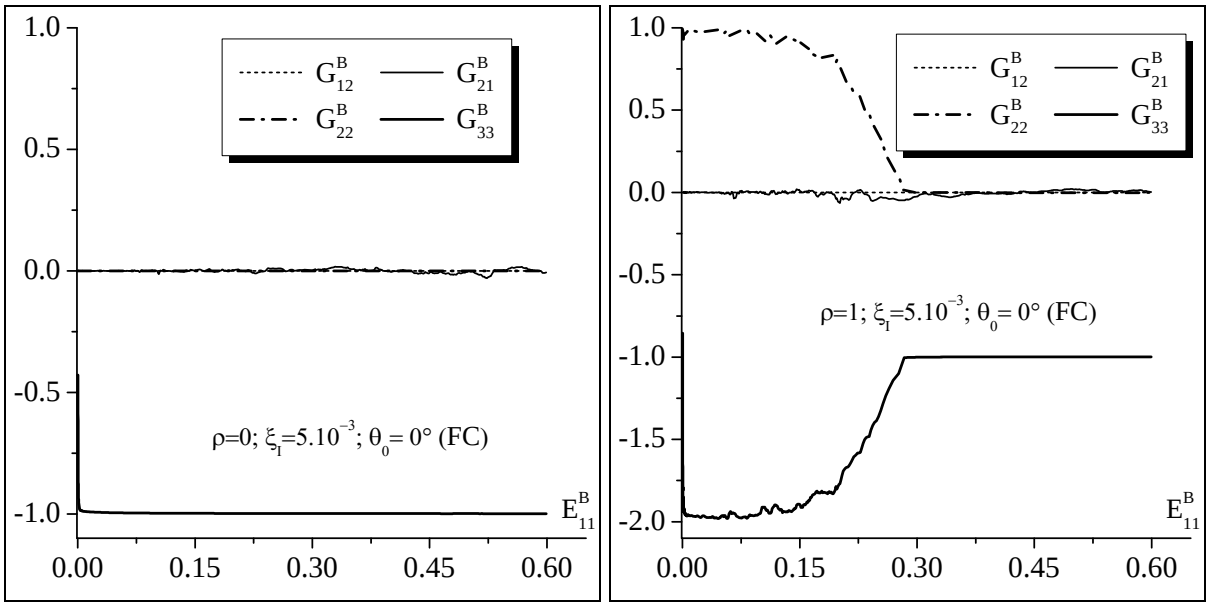
(a) (b)

Fig. 3.9. Figures de pôle de type {111}, obtenues par couplage de l'approche M–K et du modèle FC, pour un trajet de déformation en traction plane ($\rho = 0$) et une imperfection géométrique initiale ξ_1 égale à $5x10^{-3}$ et normale à la direction de laminage : (a) Zone homogène ; (b) Bande.



(a) (b)

Fig. 3.10. Figures de pôle de type {111}, obtenues par couplage de l'approche M–K et du modèle FC, pour un trajet de déformation en expansion équibiaxiale ($\rho = 1$) et une imperfection initiale ξ_I égale à $5x10^{-3}$ et normale à la direction de laminage : (a) Zone homogène ; (b) Bande.

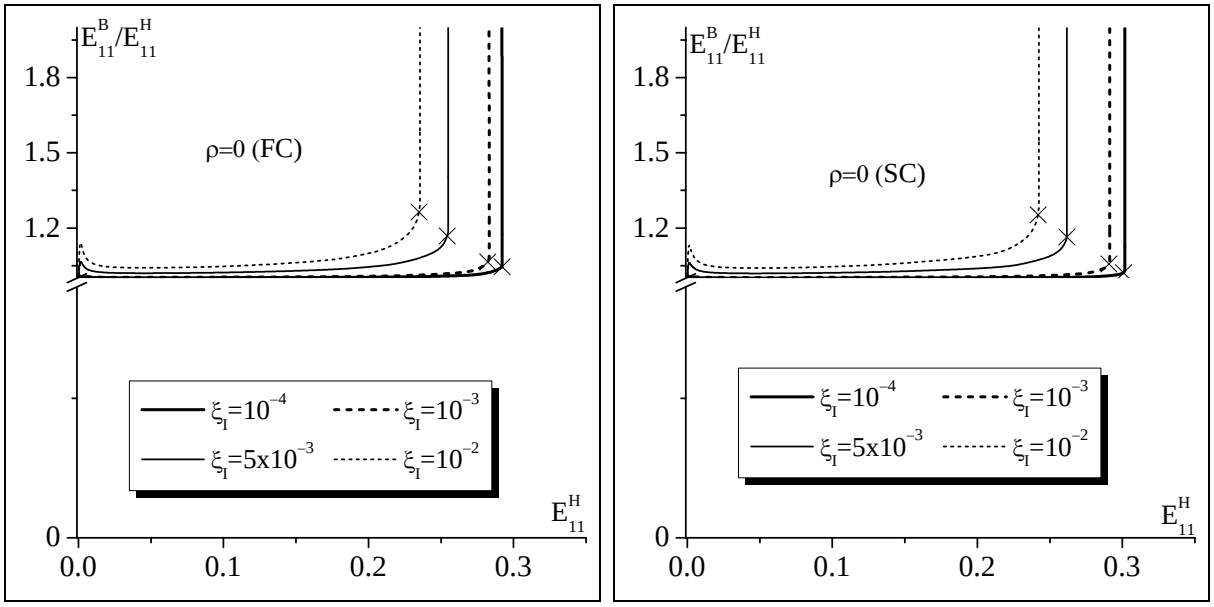


(a) (b)

Fig. 3.11. Évolution des composantes normalisées de $\mathbf{G}^B$ en fonction de E^B_{11} : (a) Traction plane ; (b) Expansion équibiaxiale.

La Fig. 3.12 montre l'évolution du rapport E^B_{11} / E^H_{11} en fonction de la déformation E^H_{11}, pour quatre valeurs différentes d'imperfection géométrique initiale. Dans le cas présent, le trajet de déformation considéré est celui de la traction plane ($\rho = 0$), et la bande reste normale à la direction de laminage. Le caractère en croix "x" introduit sur les Fig. 3.12 indique le moment d'apparition de la striction localisée. On peut observer que les résultats obtenus sont indépendants des schémas de transition d'échelles. Par ailleurs, sur la Fig. 3.12(a) où le modèle FC est utilisé, on note que, plus l'imperfection initiale est faible, plus la localisation de la déformation est brutale. En effet, lorsque l'imperfection initiale est très faible ($\xi_I = 10^{-4}$), les pentes des différentes courbes passent instantanément d'une valeur très proche de zéro à une valeur très élevée (indiquant ainsi une décharge élastique dans la zone homogène). Lorsque l'imperfection initiale augmente, la localisation survient de manière moins brutale surtout quand l'imperfection initiale ξ_I est égale à 10^{-2}. Dans ce dernier cas, deux domaines d'évolution différents de la courbe peuvent être distingués. Le premier domaine se situe approximativement entre $E^H_{11} = 0.05$ et $E^H_{11} = 0.22$. Ce domaine est caractérisé par une évolution très douce du rapport E^B_{11} / E^H_{11}. Le second domaine correspond à $E^H_{11} > 0.22$. Dans cette dernière phase, on

note une évolution très brutale de la pente qui peut atteindre des valeurs très élevées. Ces différents résultats confirment les tendances observées par Yoshida et Kuroda (2012). Par ailleurs, il faut noter que pour des imperfections initiales assez élevées (5.10^{-3} ou 10^{-2}) et à des stades précoces de la déformation, la relation d'équilibre à l'interface entre la zone homogène et la bande implique que les amplitudes des composantes du gradient de vitesse dans la zone homogène sont beaucoup plus faibles que celles dans la bande. Par conséquent, la bande subit une déformation plastique alors que l'état de déformation dans la zone homogène reste purement élastique, entrainant ainsi des valeurs très élevées du rapport E_{11}^{B} / E_{11}^{H}. Sur la Fig. 3.12(a), cette tendance peut s'observer sur l'intervalle $[0., 5.10^{-2}]$ (de E_{11}^{H}). Au-delà de ce domaine de déformation, la zone homogène commence à subir à son tour une déformation plastique, et par conséquent le rapport décroit et finalement avoisine l'unité. Il faut rappeler que ces tendances sont en parfait accord avec les résultats présentés par Yoshida et Kuroda (2012). Sur la Fig. 3.12(b), où le modèle SC est utilisé à la place du modèle FC, on note des tendances tout à fait similaires.

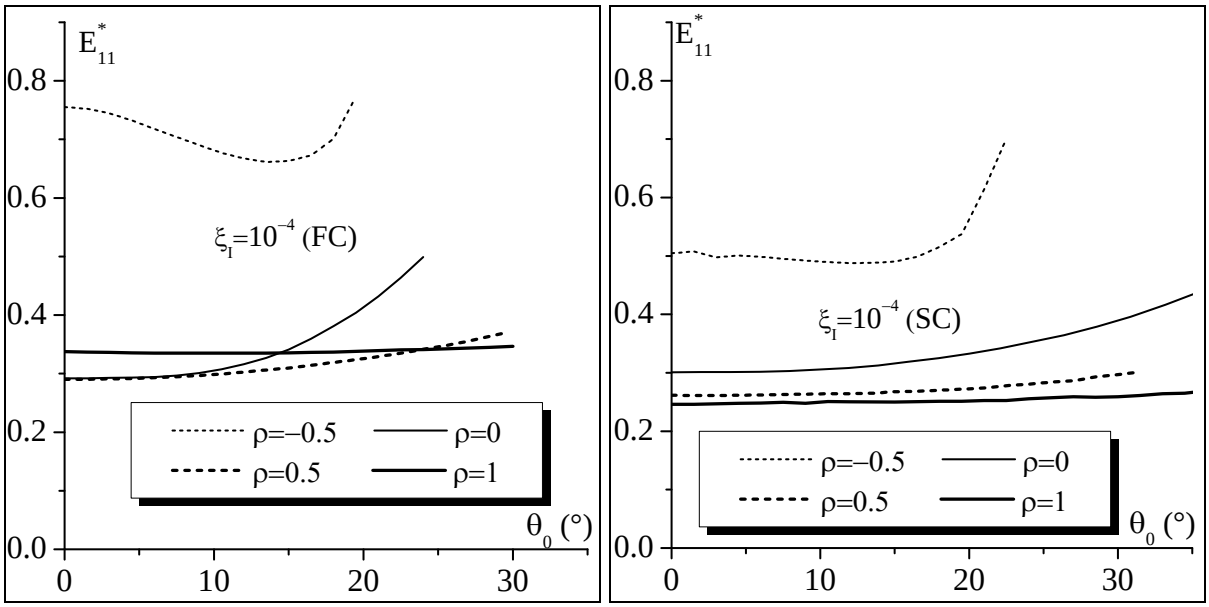


(a) (b)

Fig. 3.12. Évolution du ratio E_{11}^{B}/E_{11}^{H} en fonction de la déformation E_{11}^{H}, pour un trajet de déformation en traction plane ($\rho = 0$) et une imperfection initiale orientée de 0° par rapport à la direction de laminage : (a) modèle FC ; (b) modèle SC.

Sur la Fig. 3.13, nous montrons l'évolution de la déformation critique E_{11}^{*} en fonction de l'orientation initiale de la bande θ_0, pour quatre trajets de déformation différents. L'imperfection initiale ξ_I est fixée à 10^{-4}. Deux conclusions principales peuvent être tirées en fonction des résultats obtenus :

- La déformation critique E_{11}^{*} devient beaucoup moins sensible à l'orientation initiale de la bande lorsque le trajet de déformation ρ augmente. Les courbes illustrant les évolutions de la déformation critique en fonction de l'orientation initiale de la bande sont continues, ce qui implique qu'un incrément de 1.5° est suffisant pour détecter l'orientation de la bande qui minimise la déformation critique.
- Quelques légères différences relatives aux schémas de transition d'échelles peuvent être mises en lumière. En effet, avec le modèle SC (voir la Fig. 3.13(b)), l'orientation de la bande de localisation est égale à 0° pour tous les trajets de déformation positifs. Cependant, avec le modèle FC, l'orientation de la bande de localisation dévie légèrement de 0° pour le trajet de déformation correspondant à l'expansion équibiaxiale ($\rho = 1$). En effet, avec cette valeur de ρ, la déformation critique E_{11}^{*} décroît légèrement dans une plage de valeurs de θ_0 allant de 0° à 6°, alors qu'elle augmente par la suite. Il faut noter que ce résultat contraste avec les observations relatives aux modèles phénoménologiques, où la déformation critique E_{11}^{*} semble être indépendante de θ_0 dans le cas particulier de l'expansion équibiaxiale. Ce point est discuté plus en détails par la suite (voir la Fig. 3.14).



(a) (b)

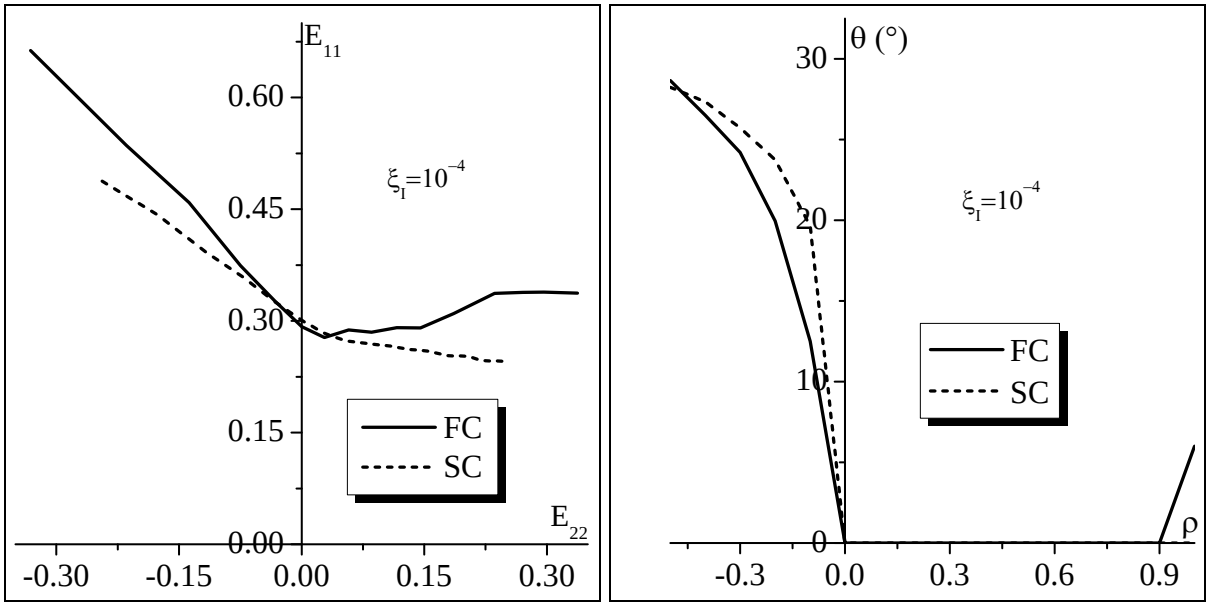
Fig. 3.13. Évolution de la déformation critique E_{11}^{*} en fonction de l'orientation initiale θ_0 de la bande, pour quatre trajets de déformation ρ avec une imperfection initiale ξ_I de 10^{-4} : (a) modèle FC ; (b) modèle SC.

La Fig. 3.14(a) compare les CLF obtenues par le couplage de l'approche M–K et des deux schémas de transition d'échelles utilisés. Il faut rappeler que, pour chaque trajet de déformation considéré ($\rho \in [-0.5, 1]$), la déformation limite prédite est le minimum des déformations critiques par rapport aux

différentes orientations possibles de la bande de localisation ($\theta_0 \in [0°, 90°]$). Par ailleurs, l'imperfection initiale ξ_I est fixée à 10^{-4} pour les différentes simulations effectuées. La tendance que l'on observe avec l'approche M–K (voir la Fig. 3.14(a)) est la même que celle observée avec le critère de bifurcation (voir la Fig. 3.8(a)) : les déformations limites déterminées par le schéma SC sont beaucoup plus faibles que celles déterminées par le schéma FC. Les courbes tracées sur les Fig. 3.8(a) et Fig. 3.14(a) illustrent clairement qu'il y a des différences entre les prédictions obtenues avec les deux schémas de transition d'échelles dans le domaine de l'expansion biaxiale, même si les formes et les niveaux des CLF sont similaires dans le domaine du rétreint. La différence entre les CLF prédites par les deux modèles d'homogénéisation peut s'expliquer par la différence d'évolution des textures cristallographiques, qui est un facteur ayant une grande influence sur la limite de ductilité, en particulier pour les trajets au voisinage de l'expansion équibiaxiale (Barlat, 1987). En effet, en utilisant la même texture cristallographique initiale, les deux schémas de transition d'échelles engendrent des textures finales qui présentent des différences notables. Cette différence est inhérente à la modélisation de la déformation locale, et celle-ci diffère suivant les deux schémas de transition d'échelles. Par ailleurs, la formabilité des tôles métalliques peut être influencée par divers paramètres microstructuraux tel que la morphologie des grains. En effet, contrairement au modèle FC, le modèle SC a la capacité de prendre en compte l'influence des formes des grains et de leurs évolutions sur le comportement macroscopique du matériau. À la connaissance de l'auteur, c'est la première fois que les CLF prédites en utilisant le schéma de Taylor–Lin sont comparées à celles obtenues par le schéma autocohérent pour le cas d'un comportement élastoplastique indépendant du temps. Cependant, dans la littérature, de telles comparaisons ont déjà été menées pour des agrégats polycristallins viscoplastiques ou élastoviscoplastiques. Dans ce cadre, on peut citer les travaux de Signorelli et al. (2012), qui ont mis en lumière le fait que le modèle SC tend à prédire des déformations limites beaucoup plus faibles que celles prédites par le modèle FC. Dans d'autres travaux, les mêmes auteurs ont obtenu des résultats contradictoires aux résultats précédents, toujours pour un comportement polycristallin viscoplastique. En effet, il a été démontré dans (Signorelli et al., 2009 et Serenelli et al., 2011) que le modèle SC permet d'obtenir des limites de ductilité plus élevées que celles prédites par le modèle FC. Cette différence de tendance entre les différents travaux est liée à la différence entre les textures cristallographiques initiales utilisées et les évolutions de ces textures durant la déformation.

L'orientation de la bande de localisation θ, déterminée au moment de l'apparition de la striction localisée, est représentée sur la Fig. 3.14(b) en fonction du trajet de déformation ρ. On peut remarquer que, d'une manière globale, l'évolution de l'orientation de la bande de localisation prédite par l'approche M–K est assez proche de celle obtenue par le critère de bifurcation. Cependant, avec l'approche M–K, la différence entre les orientations déterminées par le modèle FC et celles prédites par l'approche SC est beaucoup moins prononcée dans le domaine de l'expansion biaxiale ($\rho > 0$). En effet, les prédictions liées aux deux modèles de transition d'échelles montrent que la bande de

localisation reste normale à la direction de laminage lorsque la valeur de ρ est comprise entre 0 et 0.9. En revanche, pour le cas particulier de l'expansion équibiaxiale ($\rho = 1$), la normale à la bande dévie légèrement de la direction de laminage (de 5° environ) lorsque le modèle FC est utilisé, alors qu'elle reste confondue avec la direction de laminage lorsqu'on utilise le modèle SC.



(a) (b)

Fig. 3.14. CLF et évolution de l'orientation de la bande de localisation, prédites par couplage des modèles FC et SC avec l'approche M–K, pour une imperfection initiale ξ_I de 10^{-4} : (a) CLF ; (b) Évolution de l'orientation de la bande de localisation θ en fonction du trajet de déformation ρ.

3.5.1.4 Comparaison entre la théorie de bifurcation et l'approche par imperfection initiale

L'influence de l'imperfection initiale ξ_I sur les déformations critiques prédites E_{11}^* est illustrée sur la Fig. 3.15. Sur cette figure, nous montrons l'évolution de E_{11}^* en fonction de l'orientation initiale de la bande de localisation θ_0, pour différentes valeurs d'imperfection initiale ξ_I dans le cas de la traction plane. On peut remarquer que le niveau des courbes décroit de manière monotone lorsque l'imperfection initiale ξ_I augmente, indépendamment du schéma de transition d'échelles utilisé. On peut également observer que l'orientation initiale de la bande de localisation prédite est égale à 0° (dans le cas particulier de la traction plane). De plus, E_{11}^* atteint une valeur seuil lorsque la valeur de ξ_I tend vers zéro. En se basant sur les formulations théoriques développées dans la Section 3.2.3, il est raisonnable de prévoir que cette valeur seuil soit égale à la déformation limite correspondant au critère de bifurcation. Ce résultat important est discuté plus en détails dans les lignes qui suivent (voir la Fig. 3.17, où les CLF prédites par le critère de bifurcation sont comparées à celles prédites par l'approche M–K).

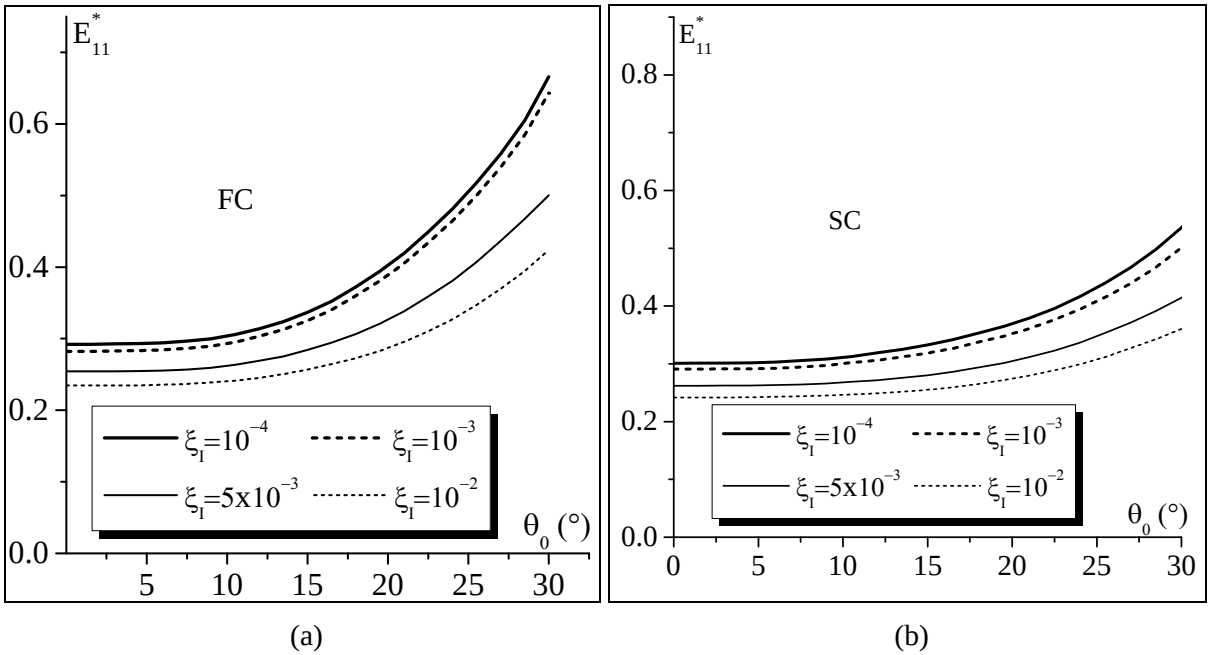


Fig. 3.15. Évolution de la déformation critique E^*_{11} en fonction de l'inclinaison initiale de la bande θ_0, pour un trajet de traction plane ($\rho = 0$) et différentes valeurs d'imperfection initiale : (a) modèle FC ; (b) modèle SC.

Comme c'est montré sur la Fig. 3.15, une augmentation de l'imperfection initiale entraîne une réduction du niveau des déformations limites. Pour illustrer davantage cette tendance, la Fig. 3.16 montre l'évolution des déformations limites majeures E_{11} en fonction de l'imperfection initiale ξ_I, en considérant quatre trajets de déformation différents. Il faut préciser que, sur cette figure, la déformation limite correspondant à l'abscisse $\xi_I = 0$ est celle obtenue par application du critère de bifurcation. On peut clairement observer que la limite de formabilité diminue quand l'imperfection initiale augmente, et cela quel que soit le trajet de déformation considéré. Notons que ce résultat est valable pour les deux modèles de transition d'échelles. La dépendance des déformations prédites au ratio d'imperfection initiale, dans le cadre d'une modélisation en plasticité cristalline avec sensibilité à la vitesse de déformation (Zhou et Neale, 1995 ; Signorelli et al., 2009) ou sans sensibilité à la vitesse de déformation (Yoshida et Kuroda, 2012), a déjà fait l'objet de plusieurs études précédentes dans la littérature. Les conclusions tirées dans la présente étude sont cohérentes avec celles reportées dans la littérature.

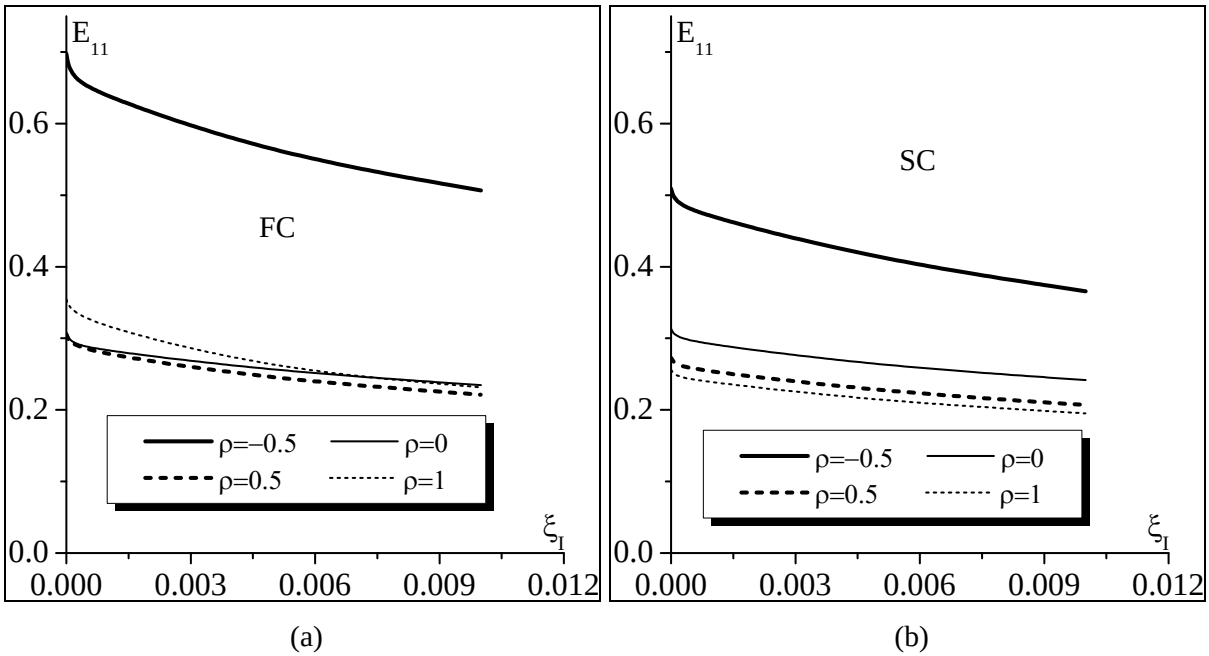
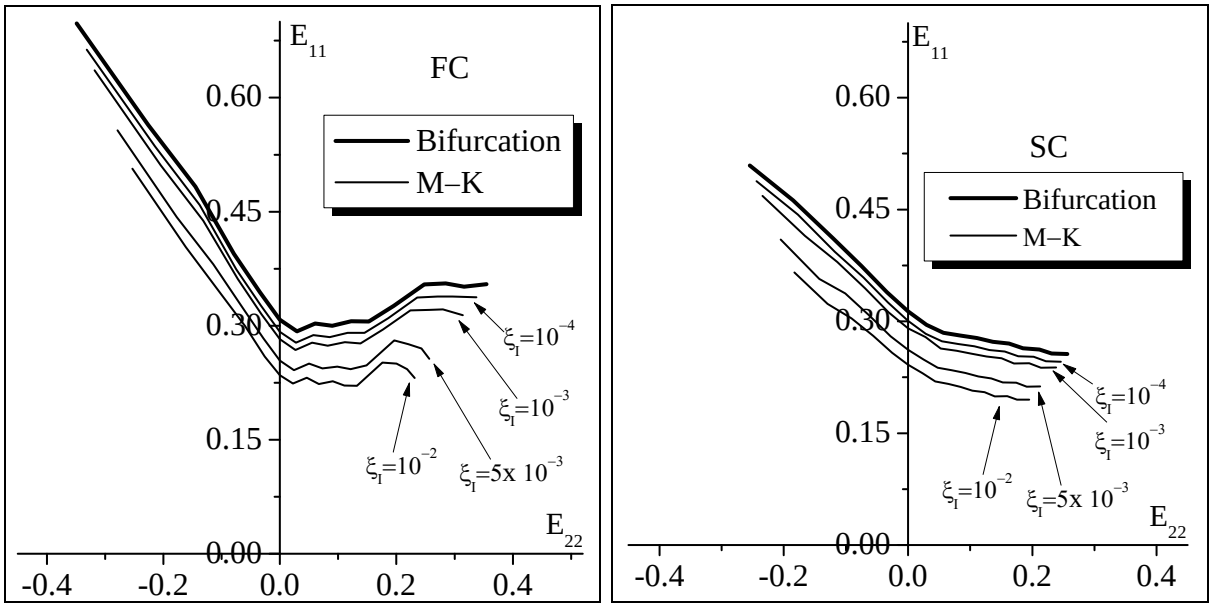


Fig. 3.16. Évolution de la déformation limite majeure E_{11} en fonction de l'imperfection initiale ξ_I, pour quatre trajets de déformation différents : (a) modèle FC ; (b) modèle SC.

La comparaison entre les CLF prédites par le critère de bifurcation et celles déterminées par l'approche M–K est montrée sur la Fig. 3.17. Quatre imperfections initiales sont utilisées pour cette étude : $\xi_I = 10^{-4}$, $\xi_I = 10^{-3}$, $\xi_I = 5\text{x}10^{-3}$ et $\xi_I = 10^{-2}$. On peut remarquer que les CLF déterminées par le critère de bifurcation représentent une limite supérieure de celles obtenues par l'approche par imperfection initiale. Ce résultat est valable pour les deux schémas de transition d'échelles étudiés, à savoir le modèle de Taylor–Lin (FC) et l'approche autocohérente (SC). En effet, la Fig. 3.17 montre que les déformations limites relatives à l'approche M–K tendent vers celles prédites par la théorie de bifurcation lorsque l'imperfection géométrique initiale ξ_I tend vers zéro. En d'autres termes, l'influence de l'imperfection initiale consiste simplement en une translation des CLF vers le bas. Au vu des similitudes entre les formulations mathématiques des deux critères de localisation, cette tendance est prévisible : l'approche M–K se réduit à l'analyse par bifurcation lorsque l'imperfection initiale est égale à zéro. Les CLF de la Fig. 3.17 confirment également que cette tendance déjà obtenue dans les résultats des Fig. 3.15 et Fig. 3.16, pour le cas particulier de la traction plane, est généralisable à tous les trajets de déformation. Il faut mentionner que ce résultat est déjà connu lorsque des modèles phénoménologiques sont utilisés pour modéliser le comportement des tôles (voir, par exemple, Ben Bettaieb et Abed-Meraim, 2015). Dans le contexte des modèles de comportement micromécaniques, une récente étude a été menée par Yoshida et Kuroda (2012). Dans cette dernière contribution, seul le modèle FC a été utilisé pour déduire les propriétés macroscopiques du matériau. Les auteurs ont observé que les déformations limites augmentent lorsqu'on réduit l'imperfection initiale et tendent à se saturer en dessous des valeurs prédites par la théorie de bifurcation, à l'exception des déformations

limites déterminées pour les trajets proches de l'expansion équibiaxiale. En effet, pour des modes de déformation en expansion équibiaxiale, Yoshida et Kuroda (2012) ont trouvé que les déformations limites prédites par l'approche M–K augmentent lorsque l'imperfection initiale décroit, et qu'elles excèdent les déformations limites prédites par le critère de bifurcation lorsque la valeur de ξ_I vaut 10^{-4}. Les différences observées entre les résultats de Yoshida et Kuroda (2012) et ceux de la présente étude (portant uniquement sur la structure cristallographique de type FC), peuvent être corrélées avec les différences des textures cristallographiques initiales utilisées comme données d'entrée pour les diverses simulations. En effet, les déformations limites prédites aussi bien par le critère de bifurcation que par l'approche M–K sont très sensibles aux variations de textures cristallographiques (aussi infimes soient-elles) pour des trajets de déformation proches de l'expansion équibiaxiale. Cette extrême influence de la texture cristallographique initiale et induite sur la prédiction de la striction localisée a déjà été soulignée dans plusieurs études de la littérature, telle que celles d'Asaro et Needleman (1985) ou Barlat (1987).

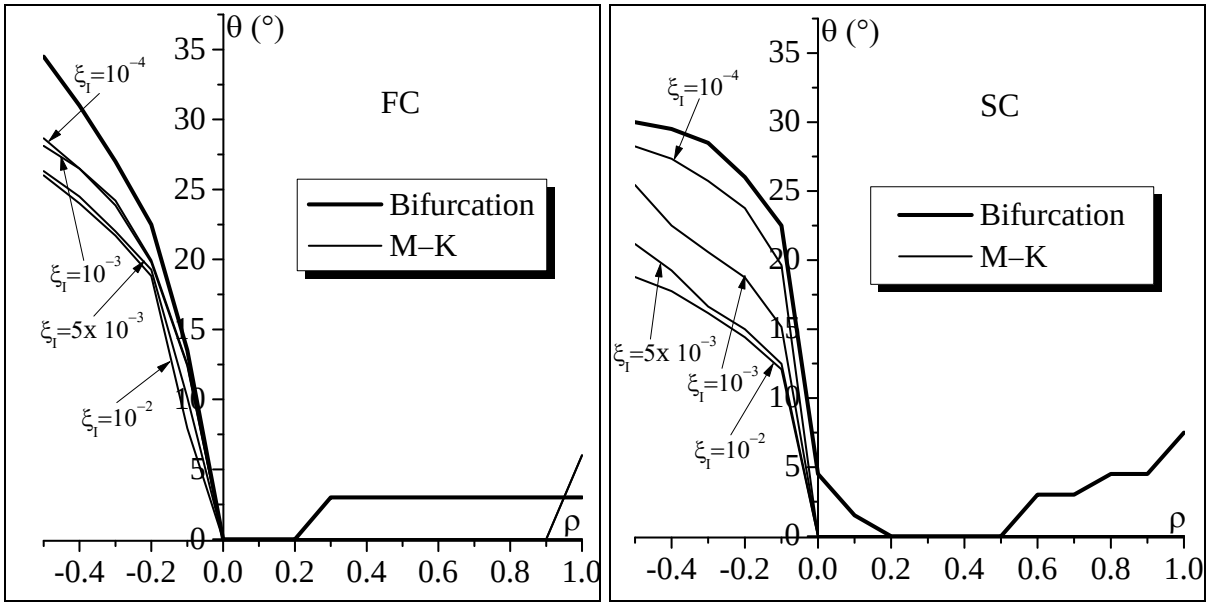


(a) (b)

Fig. 3.17. Comparaison entre les CLF prédites par l'approche M–K ($\xi_I = 10^{-4}$; $\xi_I = 10^{-3}$; $\xi_I = 5x10^{-3}$; $\xi_I = 10^{-2}$) et celles prédites par le critère de bifurcation : (a) modèle FC ; (b) modèle SC.

Sur la Fig. 3.18, les comparaisons précédentes entre l'approche M–K et le critère de bifurcation sont étendues à l'orientation de la bande de localisation. À partir de cette figure, les observations suivantes peuvent être faites :

- Lorsque l'approche M–K est appliquée, la bande de localisation reste normale à la direction de laminage pour presque tous les trajets de déformation situés dans le domaine de l'expansion biaxiale ($\rho > 0$).
- Dans le domaine des trajets de déformation négatifs, la valeur de l'orientation de la bande de localisation décroit lorsque le trajet de déformation ρ augmente. Par ailleurs, pour une valeur donnée de ρ, l'orientation de la bande décroit lorsque l'imperfection initiale augmente.
- De manière globale, les deux modèles multi-échelles conduisent à des tendances très proches en terme d'évolution de l'orientation de la bande de localisation, même si cette dernière se révèle être beaucoup plus sensible à l'imperfection initiale lorsque le modèle SC est appliqué.



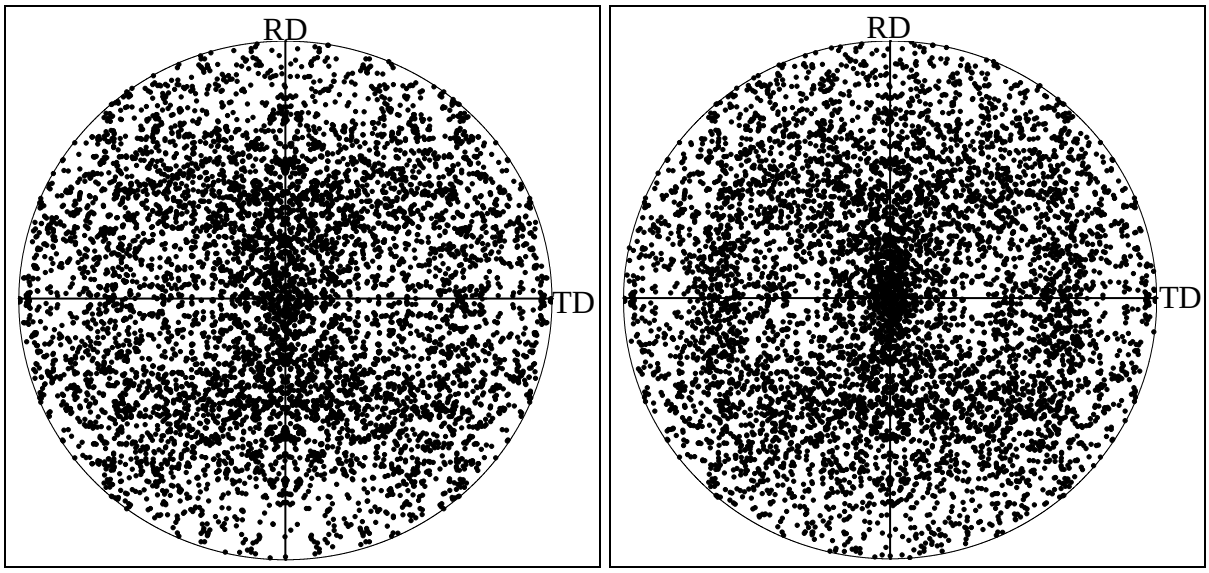
(a) (b)

Fig. 3.18. Comparaison entre l'orientation de la bande de localisation prédite par l'approche M–K ($\xi_I = 10^{-4}$; $\xi_I = 10^{-3}$; $\xi_I = 5x10^{-3}$; $\xi_I = 10^{-2}$) et celle prédite par le critère de bifurcation : (a) modèle FC ; (b) modèle SC.

3.5.1.5 Sensibilité des CLF à la texture cristallographique initiale

Il est largement admis que la texture cristallographique initiale affecte significativement la forme et le niveau des CLF (Yoshida et Kuroda, 2012 ; Bertinetti et al., 2014). En vue d'investiguer cet aspect en appliquant les modèles de ductilité que nous proposons, deux textures initiales différentes sont introduites en plus de la texture usuelle exposée dans la Fig. 3.5. Dans la suite, la texture introduite dans la Fig. 3.5 ainsi que les deux autres nouvelles textures seront nommées respectivement Texture I, Texture II et Texture III. Il est important de préciser que les Textures II et III sont déduites de la Texture I en remplaçant respectivement 500 et 1000 grains des constituants du polycristal initial par d'autres grains d'orientations cristallographiques différentes. Les Fig. 3.19(a) et b montrent les figures

de pôle de type {111} relatives aux Texture II et Texture III. On peut remarquer que ces dernières ne sont pas très différentes de la texture initiale (Texture I).



(a) (b)

Fig. 3.19. Figures de pôle de type {111} des textures modifiées : (a) Texture II ; (b) Texture III.

L'influence de la texture cristallographique initiale sur le niveau et la forme des CLF prédites par les différents critères de localisation et modèles de comportement est illustrée sur les Fig. 3.20. Dans l'ensemble, on peut observer que la sensibilité des déformations limites à la texture initiale reste très faible pour des trajets de déformation appartenant au domaine du rétreint ($\rho < 0$). Toutefois, dans le domaine de l'expansion biaxiale ($\rho \geq 0$), on note une tendance inverse. En effet, aussi bien la forme que le niveau des CLF sont fortement influencés par la texture cristallographique initiale. Cette observation est cohérente avec les travaux fondamentaux tel que Barlat (1987). Par ailleurs, dans le domaine de l'expansion biaxiale, les écarts (entre les CLF correspondant aux différentes textures cristallographiques) sont beaucoup plus importants lorsque l'approche M–K est utilisée (voir les Fig. 3.20(b) et d), comparativement au critère de bifurcation (voir les Fig. 3.20(a) et c). De plus, la Fig. 3.20(a) révèle que les déformations limites relatives aux Textures II et III prédites par le couplage du critère de bifurcation et du modèle FC sont relativement basses pour des trajets de déformation proches de l'expansion équibiaxiale, contrairement à la Texture I. Sur la Fig. 3.20(c), le même critère de localisation (à savoir l'approche par bifurcation) couplé avec le modèle SC aboutit à la formation d'un plateau dans le domaine des trajets de déformation proches de l'expansion équibiaxiale, pour le cas particulier de la Texture III. Tous ces résultats susmentionnés illustrent l'influence très forte et complexe de la texture cristallographique initiale sur les CLF.

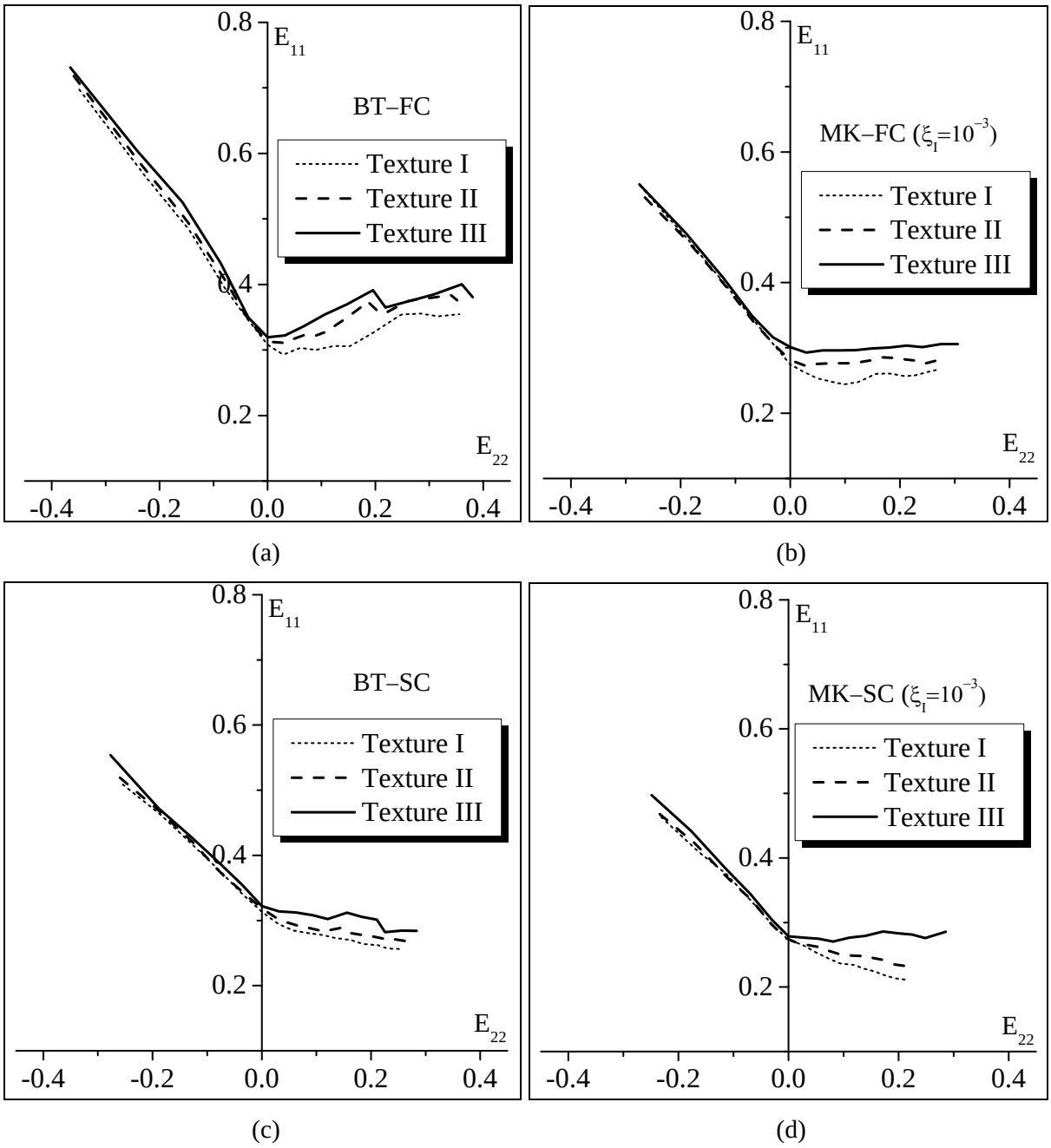
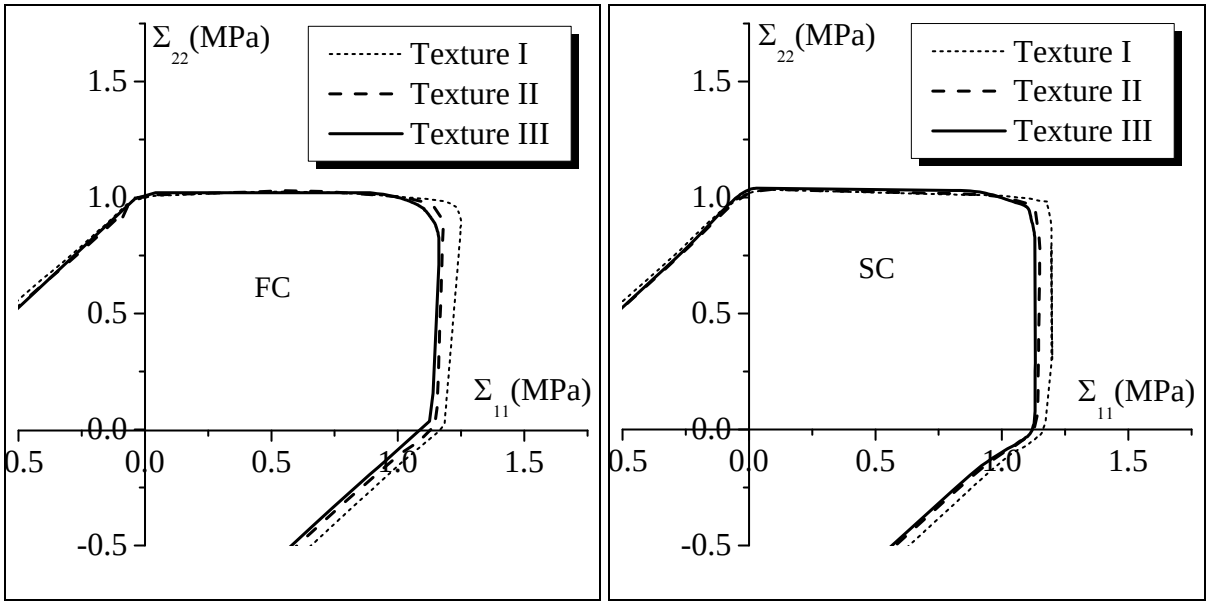


Fig. 3.20. Impact de la texture cristallographique initiale sur les CLF prédites : (a) modèle BT–FC ; (b) modèle MK–FC ($\xi_I = 10^{-3}$) ; (c) modèle BT–SC ; (d) modèle MK–SC ($\xi_I = 10^{-3}$).

De nombreuses études de la littérature mettent en lumière une corrélation très forte entre les déformations limites prédites au voisinage de l'expansion équibiaxiale et l'arrondissement de la surface de charge (Neale et Chater, 1980 ; Lian et al., 1989 ; Kuroda et Tvergaard, 2000 ; Signorelli et al., 2012). Pour investiguer davantage cette corrélation, nous traçons sur la Fig. 3.21 les surfaces de charge relatives aux trois textures présentées précédemment (Texture I, Texture II et Texture III), à des niveaux de déformations équivalents aux déformations limites de l'expansion équibiaxiale (voir la Fig. 3.21(a) pour le modèle FC et la Fig. 3.21(b) pour le modèle SC). Similairement aux procédures

décrites dans la littérature (voir par exemple l'étude de Wu et al., 2004), ces surfaces de charge sont normalisées par leurs contraintes équibiaxiales ($\Sigma_{11} = \Sigma_{22}$), en vue de comparer leurs formes. Conformément à la plupart des résultats de la littérature, une corrélation entre le niveau de la CLF au voisinage de l'expansion équibiaxiale et le degré d'arrondissement de la surface de charge associée (au voisinage de l'expansion équibiaxiale), peut être clairement établie. Plus la surface de charge est aiguë, plus la partie droite de la CLF correspondante est basse.



(a) (b)

Fig. 3.21. Surfaces de charge relatives aux trois textures cristallographiques (Texture I, Texture II, et Texture III), calculées à des niveaux de déformations équivalents aux déformations limites de l'expansion équibiaxiale : (a) modèle FC ; (b) modèle SC.

3.5.1.6 Influence de la régularisation du critère de Schmid sur la prédiction des CLF

Comme discuté précédemment, les niveaux réalistes des déformations limites obtenues dans la partie droite des CLF prédites par le critère de bifurcation est une conséquence naturelle de la présence de points de vertex sur la surface de charge (de Schmid) du monocristal. Dans cette section, nous nous intéressons à l'influence de la régularisation de la loi d'écoulement de Schmid sur les CLF prédites. L'effet de la régularisation de la surface de charge de Schmid sur la réponse contrainte–déformation et sur l'évolution des composantes du module tangent macroscopique a été étudié en détails dans la Section 2.4.8 (Chapitre 2). En l'occurrence, il a été montré à travers les résultats numériques présentés dans cette section, que les composantes du module tangent macroscopique prédites par le critère régularisé de Schmid (CRS) gardent leurs valeurs élastiques tout au long de la déformation. Une tendance nettement contrastée est observée avec le critère classique de Schmid (CCS), où les composantes de cisaillement du module tangent, représentées par L_{1212}, sont significativement réduites une fois que la phase de déformation purement élastique a été franchie. Nous avons vérifié,

sur la base de plusieurs simulations, que cette propriété est valide pour tous les trajets de déformation. L'agrégat polycristallin étudié dans cette section est constitué de 1000 grains. La texture cristallographique initiale correspondant à cet agrégat polycristallin est représentée sur la Fig. 3.22 sous forme de figure de pôle de type {111}. Par ailleurs, les paramètres d'écrouissage et d'élasticité que nous utiliserons sont les mêmes que ceux introduits dans la Section 3.5.1.1.

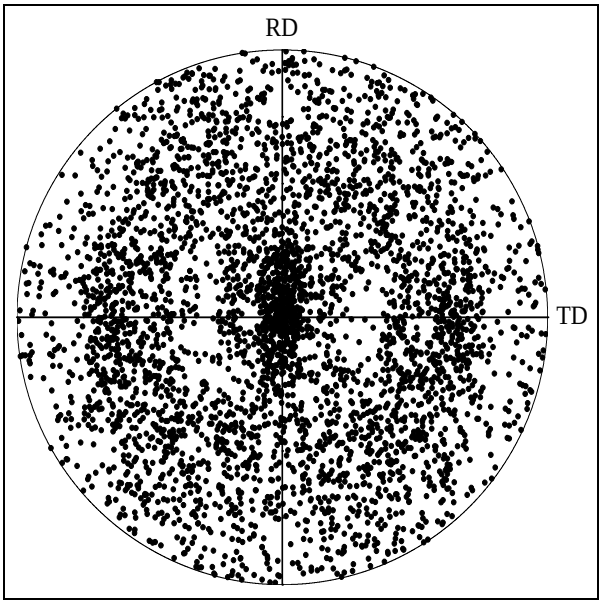
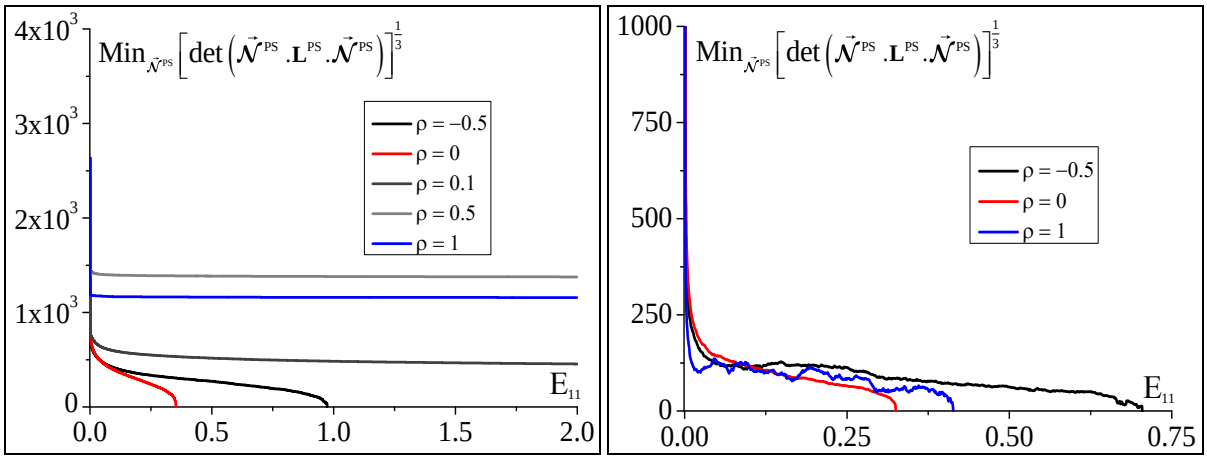


Fig. 3.22. Figure de pôle de type {111} correspondant à la texture cristallographique initiale (1000 grains).

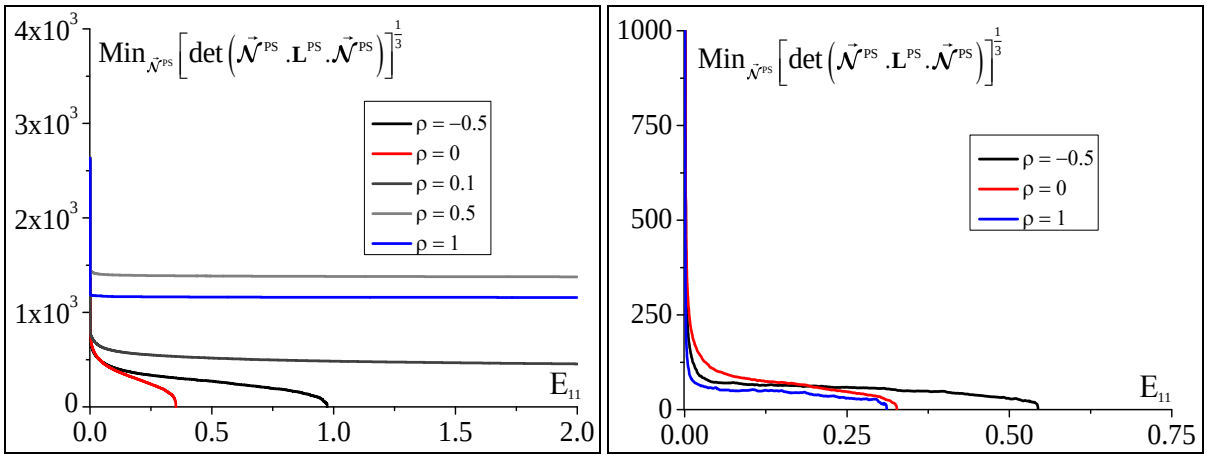
Les Fig. 3.23 et Fig. 3.24 montrent les évolutions du minimum du déterminant du tenseur acoustique, par rapport à toutes les orientations possibles de la bande de localisation, en fonction de la déformation majeure, et suivant quatre trajets de déformation différents. Sur la Fig. 3.23, le modèle FC est utilisé comme schéma de transition d'échelles. Il faut rappeler que l'apparition de la striction localisée est marquée par la singularité du tenseur acoustique (i.e., aussitôt que le déterminant de ce tenseur acoustique devient nul). Dans le domaine du rétreint (voir, par exemple, les cas de $\rho = -0.5$ et $\rho = 0$), nous observons, pour les deux lois d'écoulement (à savoir le CCS et le CRS), une chute de la valeur du déterminant du tenseur acoustique qui finit par s'annuler. Cependant, pour des trajets de déformation positifs ($\rho > 0$), la tendance est complètement différente lorsque le CRS est utilisé. En effet, le déterminant décroit très légèrement pour $\rho = 0.1$ et garde pratiquement une valeur constante pour $\rho = 1$ ou $\rho = 0.5$. Comme cela a été souligné dans la littérature pour le cas des modèles phénoménologiques (voir, par exemple, Rice, 1976 ; Hutchinson et Neale, 1978b ; Ben Bettaieb et Abed-Meraim, 2015), nous constatons que lorsque les composantes de cisaillement du module tangent gardent leurs valeurs élastiques, l'utilisation de l'approche par bifurcation comme critère de localisation aboutit à la prédiction de déformations limites irréalistes dans le domaine de l'expansion biaxiale ($\rho > 0$). Dans le cas présent, les déformations limites dépassent 200%. Sur la Fig. 3.24, une analyse similaire à celle de la Fig. 3.23 est effectuée, avec cette fois-ci le modèle de comportement

autocohérent (SC). Comme nous pouvons l'observer, l'approche autocohérente (voir la Fig. 3.24) révèle des tendances très similaires à celles obtenues avec le modèle de Taylor–Lin (FC). Par ailleurs, avec le critère classique de Schmid (CCS), les déformations limites prédites par le modèle SC sont, dans l'ensemble, beaucoup plus faibles que celles obtenues avec le modèle FC. Cependant, avec le critère régularisé de Schmid (CRS) nous ne notons pas de différences significatives entre les déformations limites obtenues avec le modèle FC et celles déterminées par le modèle SC.



(a) (b)

Fig. 3.23. Évolution du minimum du déterminant du tenseur acoustique suivant différents trajets de déformation : (a) CRS ($n = 20$) couplé au modèle FC ; (b) CCS couplé au modèle FC.

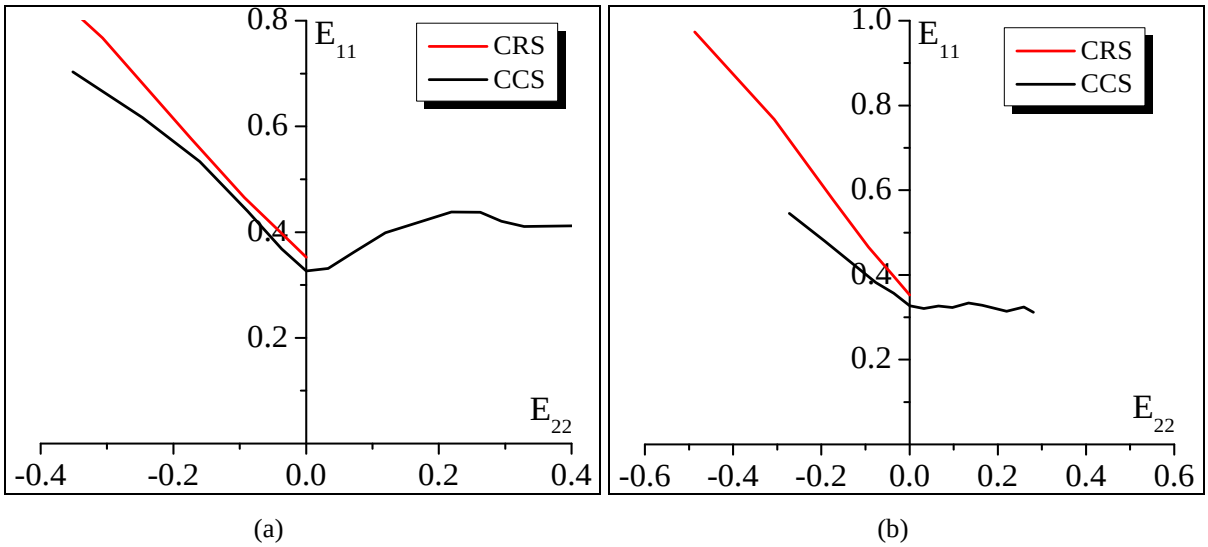


(a) (b)

Fig. 3.24. Évolution du minimum du déterminant du tenseur acoustique suivant différents trajets de déformation : (a) CRS ($n = 20$) couplé au modèle SC ; (b) CCS couplé au modèle SC.

La Fig. 3.25 montre les déformations limites obtenues pour différentes valeurs de ρ. Les deux modèles d'homogénéisation étudiés (à savoir le modèle FC et le modèle SC) sont combinés aux différentes formes du critère de Schmid (i.e., le CCS et le CRS). Comme mentionné précédemment, les déformations limites obtenues avec le CRS sont très élevées dans le domaine de l'expansion

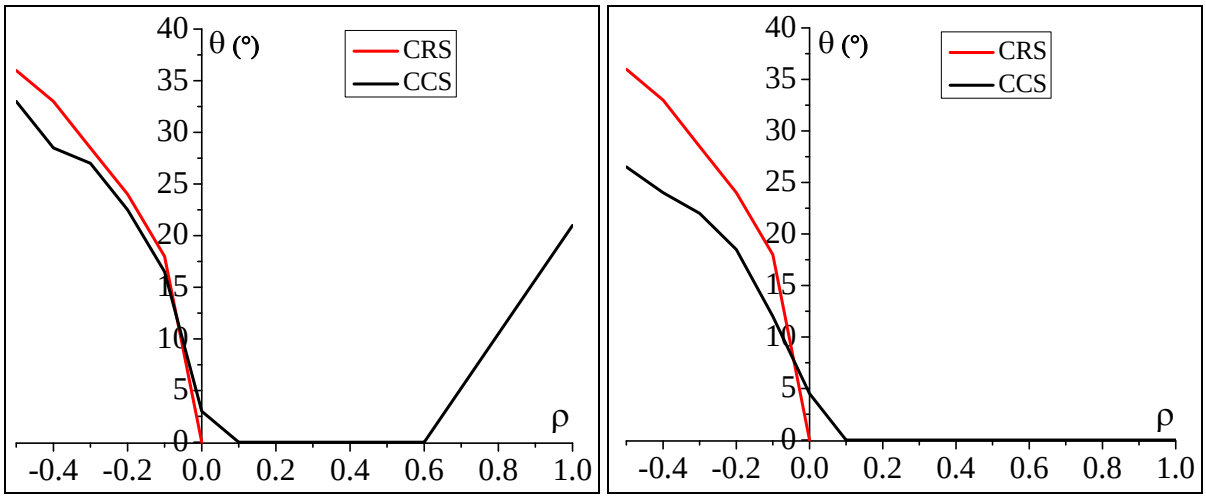
biaxiale. Cette tendance confirme les observations faites dans la Section 2.4.8 (voir les Fig. 2.38 et Fig. 2.40), où il a été prouvé que les composantes de cisaillement du module tangent déterminé par le CRS gardent leurs valeurs élastiques, conduisant ainsi à la prédiction de déformations limites irréalistes lorsque $\rho > 0$. Dans le domaine du rétreint cependant, les déformations limites du CRS ont des valeurs réalistes, même si ces dernières sont beaucoup plus élevées que leurs homologues du CCS (voir la Fig. 3.25).



(a) (b)

Fig. 3.25. CLF prédites par les deux modèles d'homogénéisation combinés aux deux versions du critère de Schmid : (a) modèle FC ; (b) modèle SC.

Les Fig. 3.26 montrent l'évolution de l'orientation de la bande de localisation en fonction du trajet de déformation ρ. Avec le modèle FC et dans le domaine du rétreint, on observe que les orientations de la bande sont insensibles à la loi d'écoulement utilisée (Fig. 3.26(a)). Cependant, avec le modèle SC les différences en termes d'orientation de la bande sont beaucoup plus marquées dans le domaine du rétreint (voir la Fig. 3.26(b)). En plus, avec ce schéma de transition d'échelles (i.e., le modèle SC) et l'agrégat polycristallin étudié (voir la Fig. 3.22 pour la texture cristallographique initiale), les bandes de localisation prédites avec le CCS restent normales à la direction de laminage dans le domaine de l'expansion biaxiale ($\rho > 0$).



(a) (b)

Fig. 3.26. Évolution de l'orientation de la bande de localisation en fonction du trajet de déformation : (a) modèle FC ; (b) modèle SC.

3.5.2 Prédiction de la striction localisée des bicouches

Cette section est consacrée à l'étude de l'impact de l'ajout d'une couche d'élastomère sur la ductilité de la bicouche. La couche de métal est représentée par un agrégat polycristallin de 2000 grains dont la texture cristallographique initiale a été générée aléatoirement (Fig. 3.27). Les paramètres microstructuraux du matériau métallique sont les mêmes que ceux introduits dans la Section 3.5.1.1. Le critère classique de Schmid (CCS) est utilisé pour modéliser l'écoulement élastoplastique à l'échelle du monocristal. Sauf indication contraire, le modèle autocohérent (modèle SC) est utilisé pour assurer la transition entre l'échelle microscopique et l'échelle macroscopique de la couche de métal. Le module de cisaillement de la couche d'élastomère est fixé à 22 MPa. Ce choix correspond aux données du polyuréa (Amirkhizi et al., 2008). Sur les différentes figures de la section suivante, la couche de métal (respectivement la bicouche) sera brièvement notée 'FM' (respectivement 'BL'). Dans le cas de la bicouche, le rapport de l'épaisseur initiale de la couche d'élastomère sur celle de la couche de métal est fixé à 0.5 pour toutes les simulations effectuées.

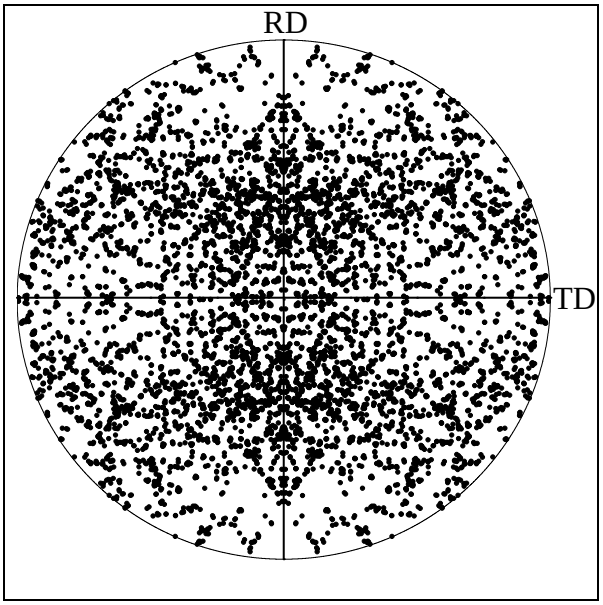
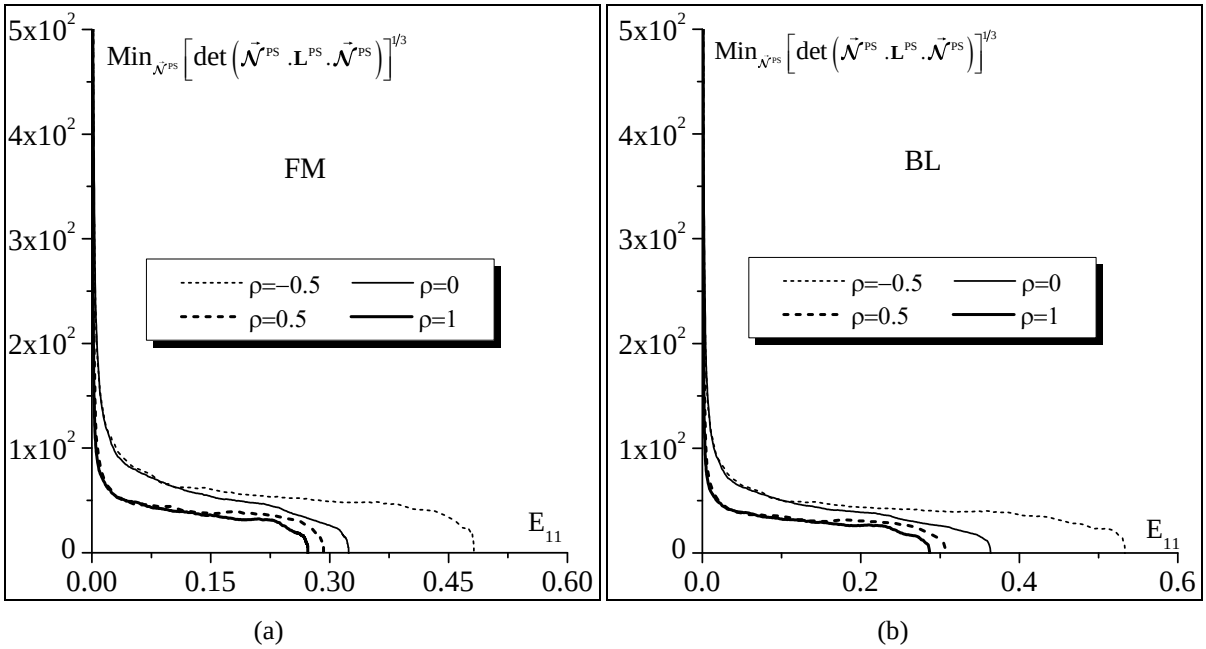


Fig. 3.27. Figure de pôle de type {111} correspondant à la texture cristallographique initiale d'un agrégat polycristallin de la couche de métal de la bicouche.

3.5.2.1 Approche par bifurcation

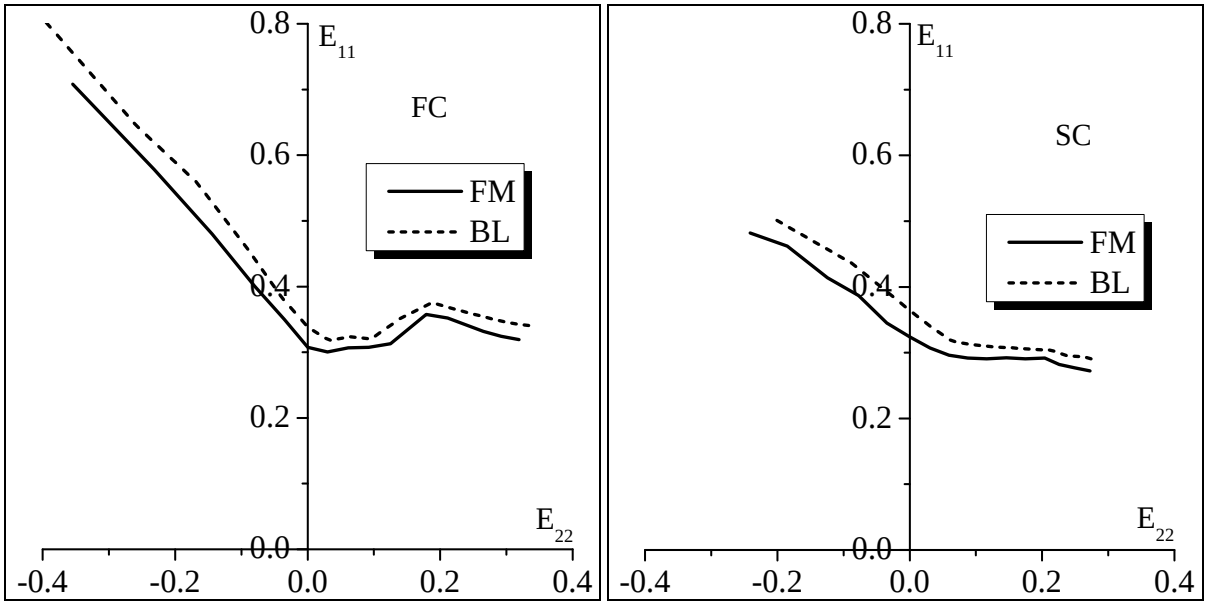
L'évolution du minimum du déterminant du tenseur acoustique $\vec{\mathcal{N}}^{PS} \cdot \mathbf{L}^{PS} \cdot \vec{\mathcal{N}}^{PS}$, (par rapport à toutes les orientations possibles de la bande de localisation), est illustré sur les Fig. 3.28 comme fonction de la déformation majeure E_{11}. Le début de la striction localisée est marqué par une réduction de ce minimum à une valeur nulle tel que défini par le critère de bifurcation (voir la relation (3.72) pour plus de détails). Quatre trajets de déformation sont considérés sur les Fig. 3.28 : $\rho = -0.5$, $\rho = 0$, $\rho = 0.5$, et $\rho = 1$. En comparant la Fig. 3.28(a) à la Fig. 3.28(b), on peut aisément remarquer que l'addition de la couche d'élastomère retarde substantiellement l'apparition de la striction localisée. Ce résultat s'explique par le fait que, sous chargement bidimensionnel, les composantes de cisaillement du module tangent relatif à la couche d'élastomère ne peuvent qu'augmenter (Ben Bettaieb et Abed-Meraim, 2015), alors que celles correspondant au matériau métallique sont résolument décroissantes (voir par exemple la Fig. 3.6).



(a) (b)

Fig. 3.28. Évolution du minimum du déterminant du tenseur acoustique en fonction de E_{11}, pour quatre trajets de déformation différents ($\rho = -0.5$, $\rho = 0$, $\rho = 0.5$, et $\rho = 1$) : (a) Couche de métal (FM) ; (b) Bicouche (BL).

L'effet de la couche d'élastomère sur la retardation de l'apparition de la striction localisée pour tous les trajets de déformations est illustré sur les Fig. 3.29. Ces prédictions confirment les résultats préliminaires représentés sur les Fig. 3.28 : l'ajout de la couche d'élastomère entraine une translation de la CLF vers le haut, et par conséquent une augmentation de la ductilité de la bicouche.

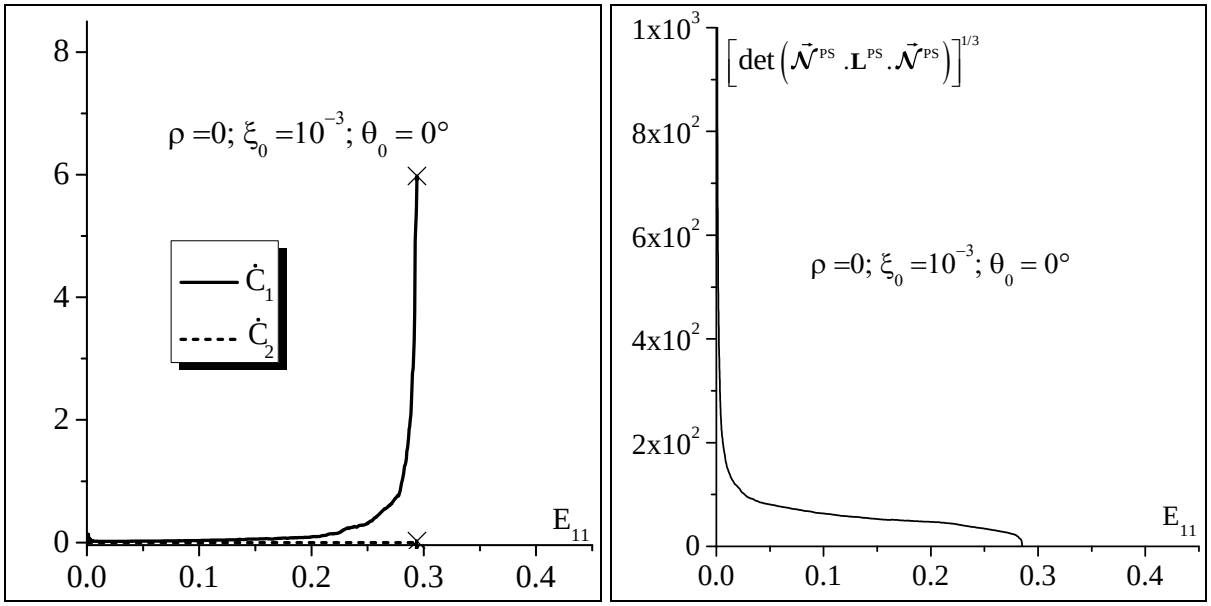


(a) (b)

Fig. 3.29. Effet de la couche d'élastomère sur la ductilité de la bicouche : (a) modèle FC ; (b) modèle SC.

3.5.2.2 Approche par imperfection initiale

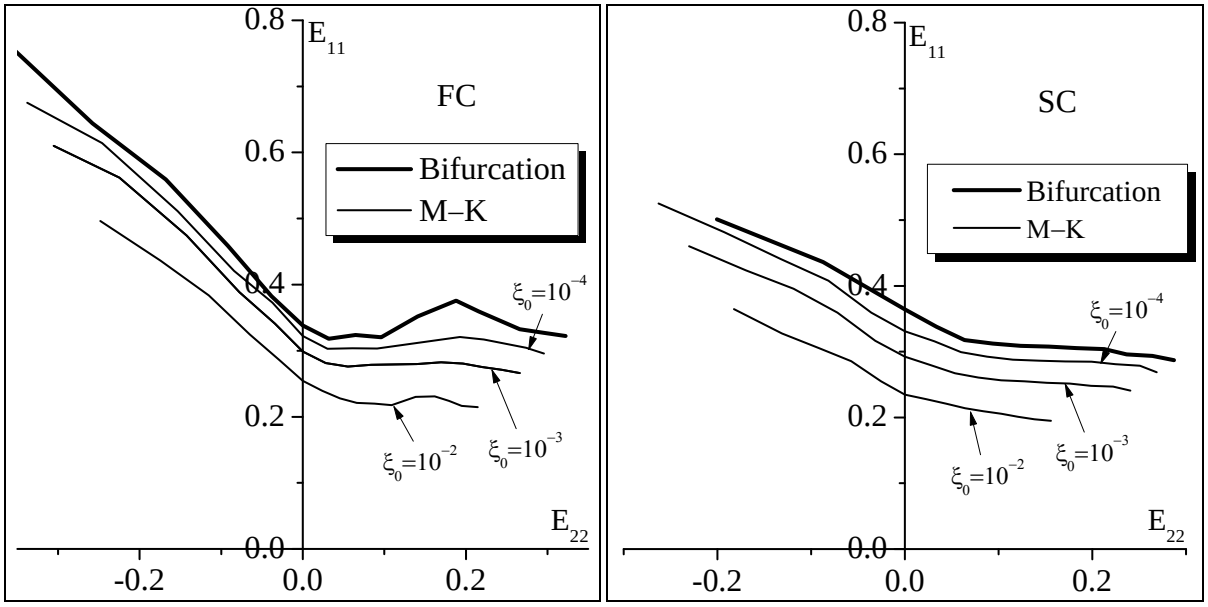
Pour étudier l'apparition de la striction localisée dans la bicouche, l'évolution des composantes du vecteur saut $\dot{\vec{\mathbf{C}}}$ ainsi que le déterminant du tenseur acoustique dans la bande sont tracés sur les Fig. 3.30 en fonction de la déformation majeure dans la zone homogène E_{11}. Pour l'obtention de ces résultats, le trajet de déformation ρ, l'imperfection géométrique initiale ξ_0 et l'orientation initiale de la bande de localisation θ_0 sont fixés respectivement à 0, 10^{-3} et 0°. À partir de la Fig. 3.30(a), on peut conclure que les composantes $\dot{C}_1$ et $\dot{C}_2$ du vecteur saut $\dot{\vec{\mathbf{C}}}$ sont très proches de 0 avant l'apparition de la localisation. Par la suite, la première composante $\dot{C}_1$ augmente très brutalement lorsque la composante de la déformation E_{11} dans la zone homogène atteint une valeur de l'ordre de 0.28. Cette évolution brutale entraine la localisation de la déformation dans la bande. Pour confirmer cette observation, l'évolution du déterminant du tenseur acoustique dans la bande est tracée sur la Fig. 3.30(b). Nous observons que la déformation limite (0.28) est atteinte lorsque le déterminant devient égal à 0. Ce résultat est escompté, au vu des similarités des formulations mathématiques entre le critère de bifurcation et l'approche M–K. L'évolution du déterminant du tenseur acoustique dans la bande peut donc être utilisé comme un indicateur alternatif fiable de l'apparition de de la striction localisée dans la bicouche suivant les différents trajets de déformation.



(a) (b)

Fig. 3.30. Illustration de l'apparition de la striction localisée dans la bicouche ($\rho = 0$; $\xi_0 = 10^{-3}$; $\theta_0 = 0°$) : (a) Évolution des composantes du vecteur saut $\dot{\vec{\mathbf{C}}}$ en fonction de la déformation majeure dans la zone homogène E_{11} ; (b) Évolution du déterminant du tenseur acoustique dans la bande en fonction de la déformation majeure dans la zone homogène E_{11}.

La comparaison entre les CLF prédites par la théorie de bifurcation et celles déterminées par l'approche M–K est représentée sur la Fig. 3.31. Trois valeurs différentes d'imperfection géométrique initiale ξ_0 sont considérées : 10^{-4}, 10^{-3} et 10^{-2}. Il apparaît très clairement que la forme et le niveau des CLF sont largement influencés par l'imperfection géométrique initiale. On peut également remarquer que pour tous les trajets de déformation, les déformations limites déterminées par le critère de bifurcation représentent une borne supérieure de celles déterminées par l'approche M–K. Par ailleurs, il faut mentionner que ce résultat est valable pour les deux schémas de transition d'échelles utilisés, à savoir les modèles FC et SC.



(a) (b)

Fig. 3.31. Effet de l'imperfection géométrique initiale sur la forme et le niveau des CLF de la bicouche : (a) modèle FC ; (b) modèle SC.

3.5.3 Prédiction des instabilités plastiques dans les tôles soumises à des procédés de mise en forme

Le modèle de comportement autocohérent développé dans le Chapitre 2 est implanté, sous la forme d'une subroutine UMAT, dans le logiciel de calcul par éléments finis ABAQUS/Implicit pour des applications en calcul de structure. Cette implantation a ensuite été utilisée pour simuler l'emboutissage à froid de plusieurs éprouvettes de type Nakazima (Fig. 3.34). Pour prédire l'apparition d'instabilités plastiques dans l'éprouvette durant l'emboutissage, le critère de perte d'ellipticité (voir l'équation (3.17)) a été associé au modèle de comportement dans la subroutine UMAT. Contrairement aux études précédentes, où le critère de bifurcation était utilisé pour prédire des instabilités de type exclusivement matériau, le critère de perte d'ellipticité utilisé dans cette section prédit des instabilités pour lesquels l'aspect géométrique (structural) joue un rôle non négligeable et affecte la prédiction d'instabilités.

3.5.3.1 Paramètres du matériau

Les paramètres microstructuraux de l'agrégat polycristallin que nous considérons sont les suivants :

- Les coefficients de Lamé λ et μ sont fixés respectivement à 49.41 GPa et 25.45 GPa.
- Les paramètres d'écrouissage sont les mêmes que ceux introduits dans la Section 3.5.1.1.

Afin d'optimiser la simulation du procédé d'emboutissage en utilisant un modèle de comportement multi-échelles, une étude de sensibilité est préalablement effectuée pour déterminer le nombre de grains minimal à utiliser pour obtenir une description représentative du comportement macroscopique de l'agrégat polycristallin (associé à chaque point de Gauss du maillage). Cette étude préliminaire a permis de conclure qu'un polycristal à 500 grains est un choix optimal pour avoir un volume élémentaire représentatif du comportement macroscopique tout en minimisant les temps de calcul CPU. La texture cristallographique initiale du polycristal affecté à chaque point d'intégration du modèle EF étudié est illustrée sur la Fig. 3.32.

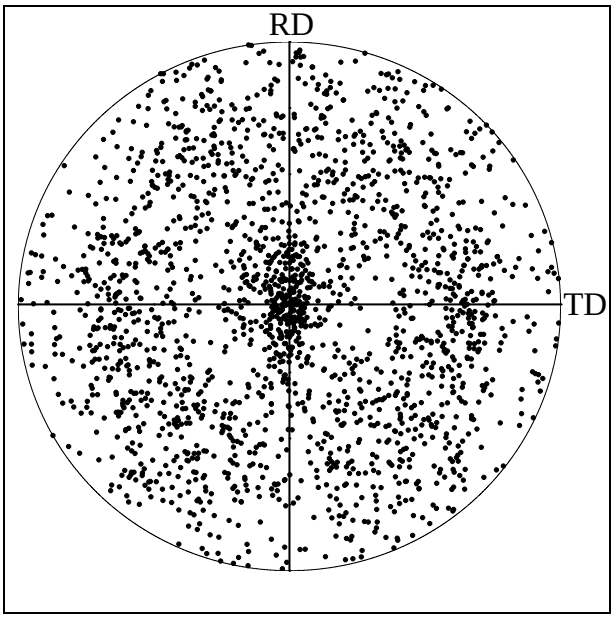


Fig. 3.32. Figure de pôle de type {111} représentant la texture cristallographique initial de l'agrégat polycristallin associé aux points de Gauss du maillage.

3.5.3.2 Simulation du procédé d'emboutissage à froid des tôles métalliques

L'emboutissage à froid de la tôle par poinçon hémisphérique est simulé afin de prédire l'apparition d'instabilités plastiques. La description du dispositif d'emboutissage est illustrée sur la Fig. 3.33 où le diamètre du poinçon vaut 100 mm. Le frottement entre le poinçon et l'éprouvette (de type Nakazima) est modélisé par la loi de Coulomb. Le coefficient de frottement est fixé à 0.1. La géométrie plane et les dimensions caractéristiques de l'éprouvette (Fig. 3.34) sont les mêmes que celles définies dans Kami et al. (2015). L'épaisseur de l'éprouvette est toutefois fixée à 1 mm pour toutes les études réalisées dans cette section. Par ailleurs, pour simuler différents trajets de déformation, nous avons utilisé trois valeurs de la largeur w (voir la Fig. 3.34 pour plus de détails) : 30 mm pour avoir une

traction uniaxiale ($\rho = -0.5$), 90 mm pour avoir une traction plane ($\rho = 0$), et enfin 185 mm pour avoir un état d'expansion équibiaxiale ($\rho = 1$). Le maillage des outils du dispositif d'emboutissage (poinçon et serre-flans) est réalisé avec des éléments rigides tridimensionnels à 4 nœuds (R3D4), tandis que celui de l'échantillon est composé d'éléments tridimensionnels linéaires à 8 nœuds à intégration réduite (C3D8R). Il faut par ailleurs préciser que le maillage de l'échantillon compte 3 éléments dans l'épaisseur en vue de bien modéliser les effets de flexion, et ainsi améliorer la précision du calcul. Ce choix pratique nous semble être un bon compromis entre la précision des résultats et la réduction des temps de calcul. Toutefois, à cause des fortes sollicitations qui prévalent dans la zone de contact entre le poinçon et l'éprouvette, nous augmentons la densité du maillage dans cette zone. Les conditions aux limites que nous appliquons pour simuler le procédé d'emboutissage sont de type déplacement. En effet, le poinçon est translaté vers le bas d'une valeur de 60 mm.

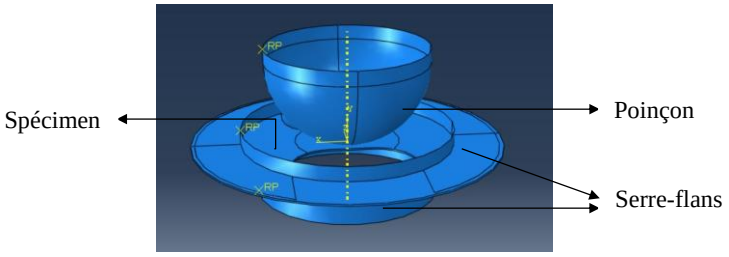


Fig. 3.33. Description schématique du dispositif d'emboutissage.

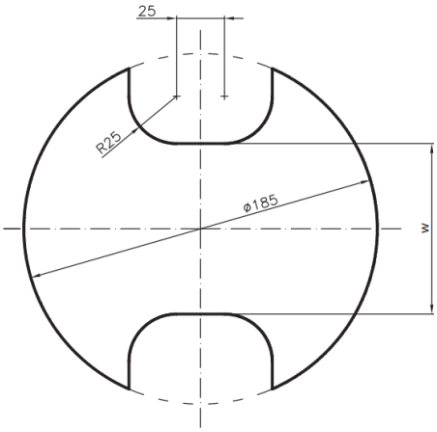


Fig. 3.34. Dimensions caractéristiques de l'éprouvette utilisée pour les tests de Nakazima (Kami et al., 2015).

La Fig. 3.35 montre les courbes représentant l'évolution de la force du poinçon en fonction du déplacement pour les trois trajets de déformation considérés. Comme attendu, on remarque que lorsque la largeur de l'échantillon w augmente, l'intensité maximale de la force du poinçon augmente également. Les marquages en point présents sur les différentes courbes indiquent les instants auxquels surviennent les instabilités prédites par le critère de perte d'ellipticité. Par ailleurs, on peut s'apercevoir que l'apparition de ces instabilités plastiques n'a pas forcément lieu à l'instant où le maximum de la force du poinçon est atteint.

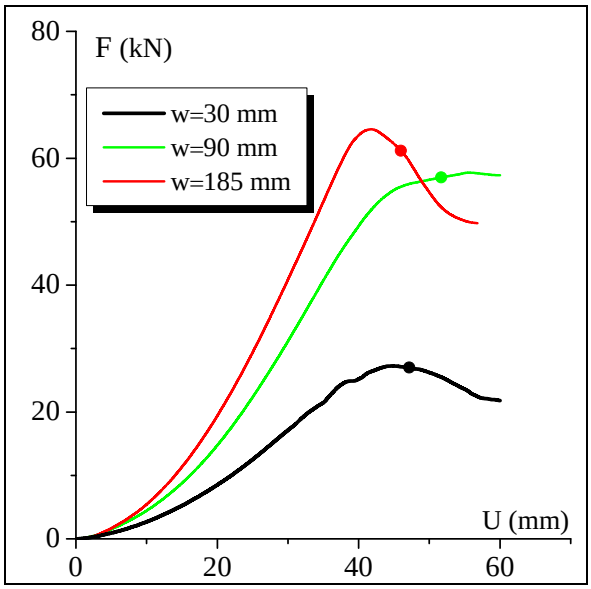


Fig. 3.35. Relation force-déplacement du poinçon pour différentes géométries de l'éprouvette.

Les Fig. 3.36 montrent les déformées correspondant aux différentes éprouvettes, ainsi que la distribution des contraintes de von Misès au moment de l'apparition des instabilités. On peut remarquer que les différentes valeurs de la contrainte équivalente sont relativement faibles dans la zone centrale de l'éprouvette et atteignent leurs maximums dans la zone périphérique.

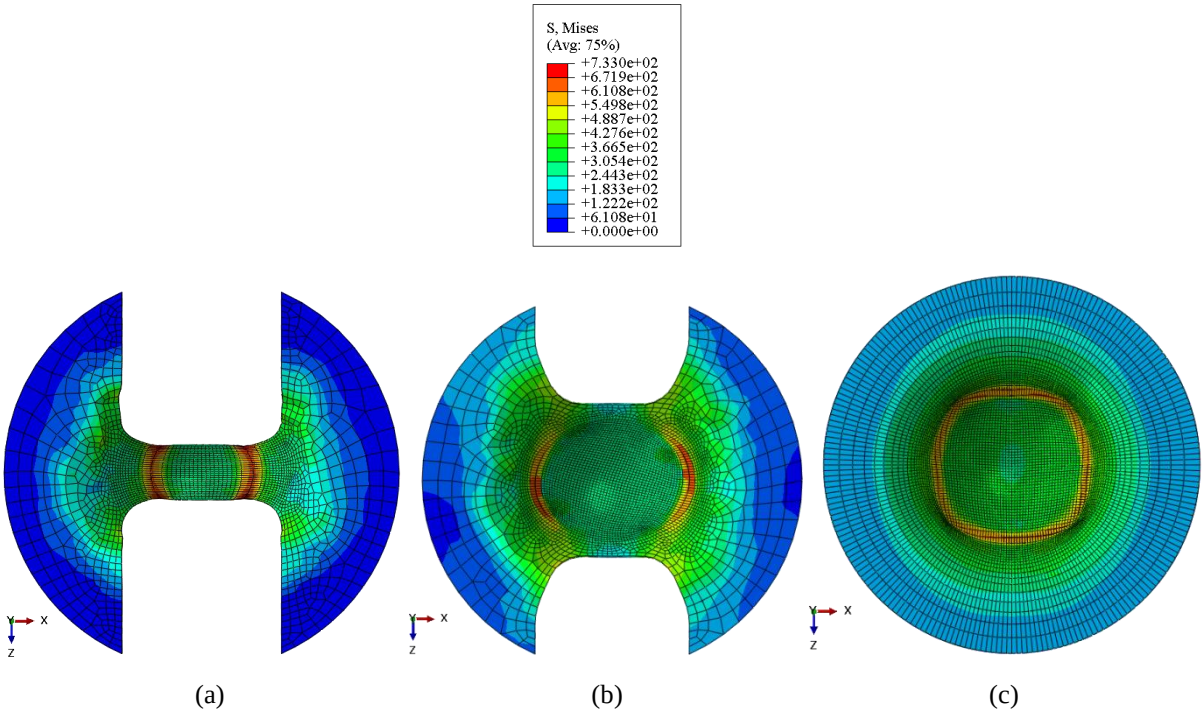
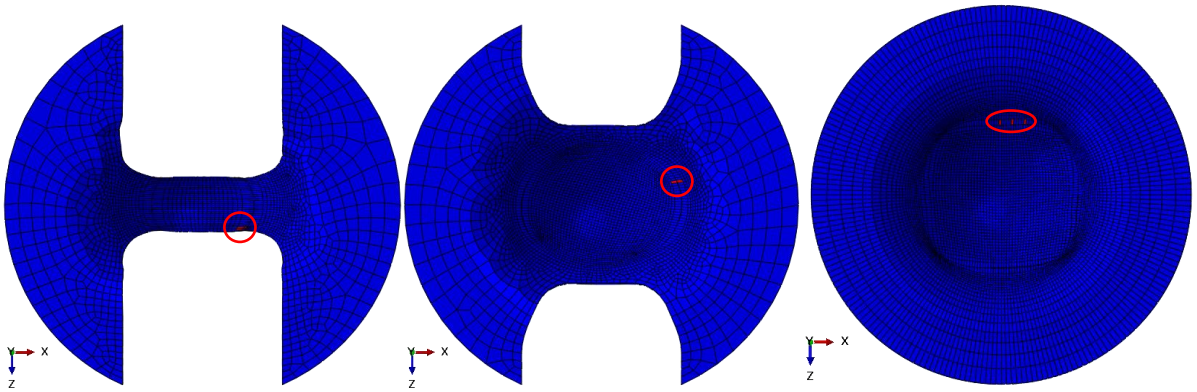


Fig. 3.36. Distribution de la contrainte équivalente de von Misès dans les différentes éprouvettes au moment de l'apparition des instabilités plastiques : (a) w = 30 mm ; (b) w = 90 mm ; (c) w = 185 mm.

Pour illustrer l'évolution des instabilités plastiques dans l'éprouvette, nous associons à chaque élément de la structure un indicateur sous la forme d'une variable binaire. Cet indicateur a pour valeur 0

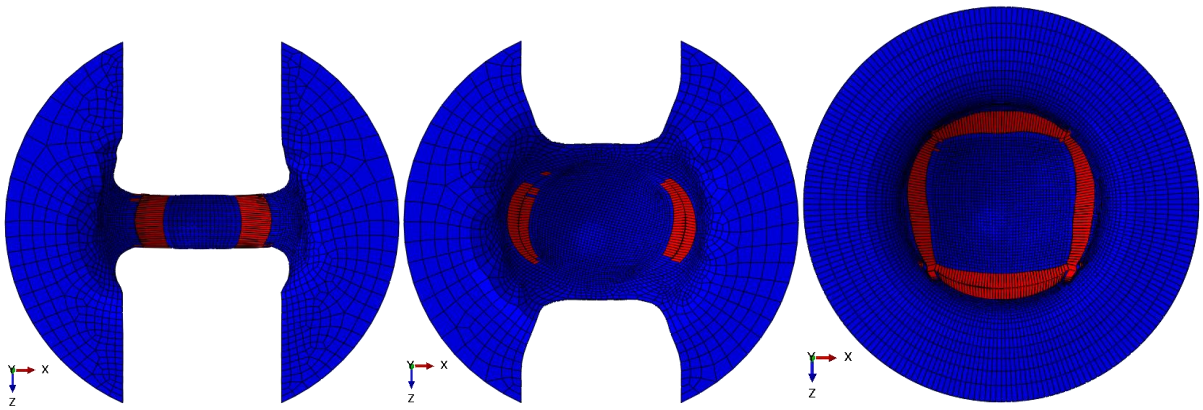
(respectivement 1) lorsque le minimum du déterminant du tenseur acoustique, par rapport à toutes les orientations possibles de la bande de localisation, est positif (respectivement négatif). La Fig. 3.37 est une photographie des différentes éprouvettes au moment de l'apparition de la localisation. Sur cette figure, la couleur rouge correspond à la valeur 1 de l'indicateur (et par conséquent aux éléments dans lesquels l'instabilité plastique est détectée) et la couleur bleue à la valeur 0. De manière globale, on peut observer que la localisation débute dans la zone périphérique du dôme, où la contrainte de von Misès est maximale (voir la Fig. 3.36).



(a) (b) (c)

Fig. 3.37. Distribution de l'indicateur de perte d'ellipticité dans les différentes éprouvettes au moment de l'apparition des instabilités plastiques : (a) w = 30 mm ; (b) w = 90 mm ; (c) w = 185 mm.

La distribution de l'indicateur de perte d'ellipticité dans les différentes éprouvettes à la fin de la simulation (correspondant à un déplacement du poinçon de 60 mm) est illustrée sur la Fig. 3.38. On peut noter que la zone d'instabilité a été étendue à toute la zone périphérique du dôme.

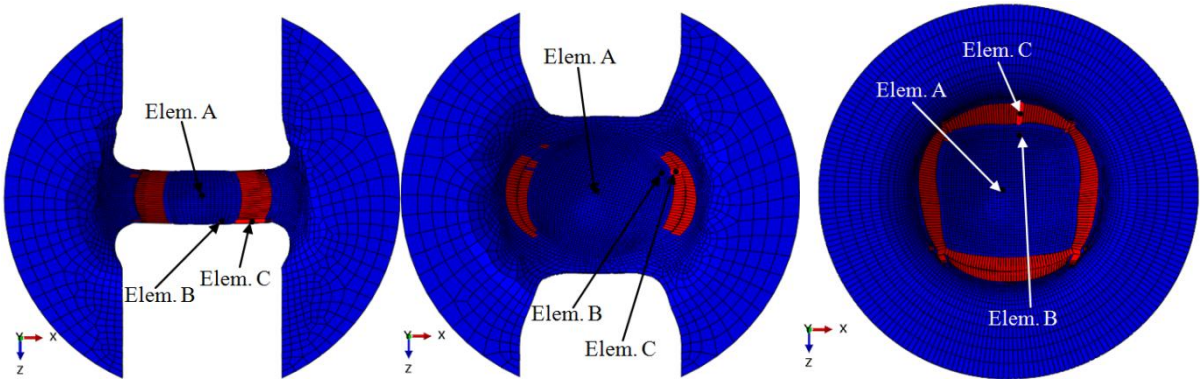


(a) (b) (c)

Fig. 3.38. Distribution de l'indicateur de perte d'ellipticité dans les différentes éprouvettes à la fin de la simulation : (a) w = 30 mm ; (b) w = 90 mm ; (c) w = 185 mm.

En vue d'étudier plus en détails l'initiation et l'évolution des instabilités, nous sélectionnons les trois éléments suivants de la structure : L'élément A (Elem. A), qui correspond au point central de

l'éprouvette, l'élément B (Elem. B), qui est assez proche de la zone de localisation tout en restant en dehors de celle-ci, et l'élément C (Elem. C), qui n'est autre que l'élément dans lequel l'instabilité plastique est détectée pour la première fois (voir la Fig. 3.39).



(a) (b) (c)

Fig. 3.39. Sélection de quelques éléments de la structure pour l'étude des instabilités : (a) w = 30 mm ; (b) w = 90 mm ; (c) w = 185 mm.

L'évolution de la vitesse de déformation plastique équivalente de von Misès D^p_{eq}, en fonction du déplacement du poinçon pour les différents éléments susmentionnés, est tracée sur la Fig. 3.40. On peut clairement observer que l'Elem. A (respectivement l'Elem. C) a la plus faible vitesse (respectivement la plus forte vitesse) de déformation plastique équivalente, parmi les trois éléments sélectionnés. Par suite, l'Elem. A enregistre une faible valeur de D^p_{eq}, alors que l'Elem. C affiche une forte vitesse de déformation plastique équivalente qui a une évolution brutale à partir d'un certain instant, entraînant ainsi une localisation de la déformation. Cette tendance est commune aux trois éprouvettes étudiées. Il faut cependant noter que la vitesse de déformation plastique équivalente D^p_{eq} n'a pas la même évolution dans les différents éléments. En effet, pour l'Elem. A et l'Elem. B, la valeur de D^p_{eq} augmente avant la localisation de la déformation dans l'échantillon, puis diminue après, marquant ainsi la décharge élastique dans les agrégats polycristallins associés à ces éléments. Pour l'Elem. C cependant, D^p_{eq} augmente de manière monotone, et atteint de très fortes amplitudes par la suite. Par conséquent, c'est dans cet élément que survient l'instabilité plastique. Ces tendances peuvent être corrélées aux résultats obtenus dans le cadre de l'approche M–K (Ben Bettaieb et Abed-Meraim, 2015). En effet, l'Elem. A et l'Elem. B jouent en quelque sorte le rôle de la zone homogène, alors que l'Elem. C joue le rôle de la bande de localisation. Cependant, contrairement à l'approche M–K, la localisation de la déformation peut être mise en évidence dans les simulations EF sans l'introduction préalable d'une imperfection initiale de type géométrique ou matériau.

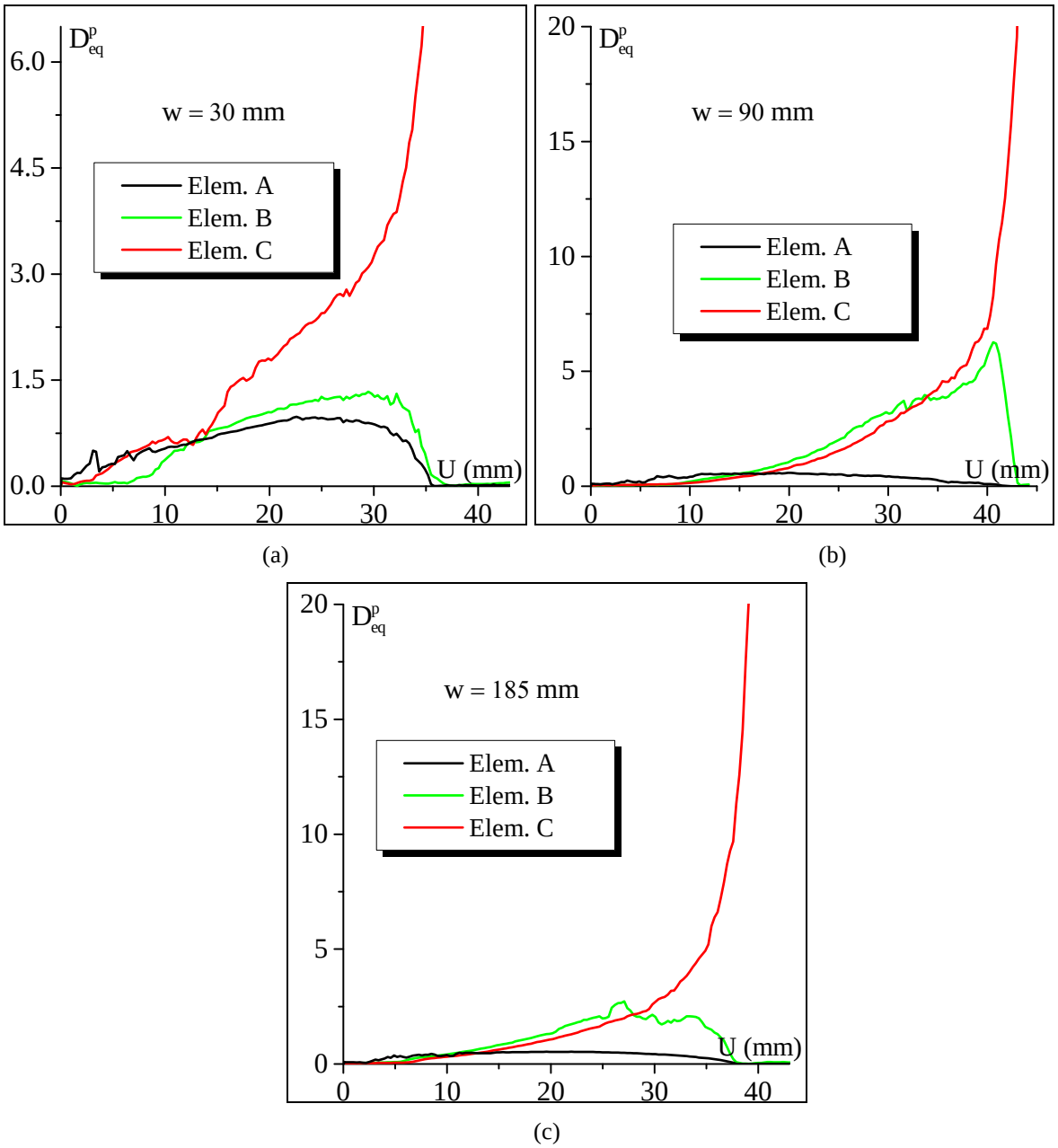


Fig. 3.40. Évolution de la vitesse de déformation plastique équivalente en fonction du déplacement du poinçon U : (a) w = 30 mm ; (b) w = 90 mm ; (c) w = 185 mm.

Un des avantages que l'on tire de l'utilisation de modèles de comportement multi-échelles (comparés aux modèles phénoménologiques classiques) pour des simulations par éléments finis, est leur capacité à prendre en compte l'effet de l'anisotropie plastique initiale et induite par déformation plastique. Cette anisotropie a un fort impact sur le calcul des variables mécaniques aux différents points de Gauss du maillage, et par conséquent sur la réponse macroscopique de l'éprouvette. Nous investiguons cette question en considérant les textures cristallographiques finales des agrégats polycristallins des trois éléments finis susmentionnés (Elem. A, Elem. B, et Elem. C). Les figures de pôle de type {111} associées à ces différentes textures sont présentées sur la Fig. 3.41. On peut remarquer que la texture finale de l'Elem. A (indépendamment de la géométrie de l'éprouvette) n'est pas très différente de la

texture initiale (voir la Fig. 3.32(b)). Ce résultat est attendu au vu du fait que la déformation (tout comme la rotation) dans cet élément fini restent très modérés, comparativement aux autres éléments (Elem. B et Elem. C). Ainsi, l'influence de l'anisotropie induite par rotation du réseau cristallographique à l'échelle du monocristal est faible à la fin du chargement. D'autre part, les textures finales correspondant respectivement à l'Elem. B et l'Elem. C sont nettement différentes de la texture de référence. Ce résultat s'explique par les niveaux plus ou moins élevés des taux de déformation (et naturellement des taux de rotation) dans les éléments finis associés, comme le montre la Fig. 3.40.

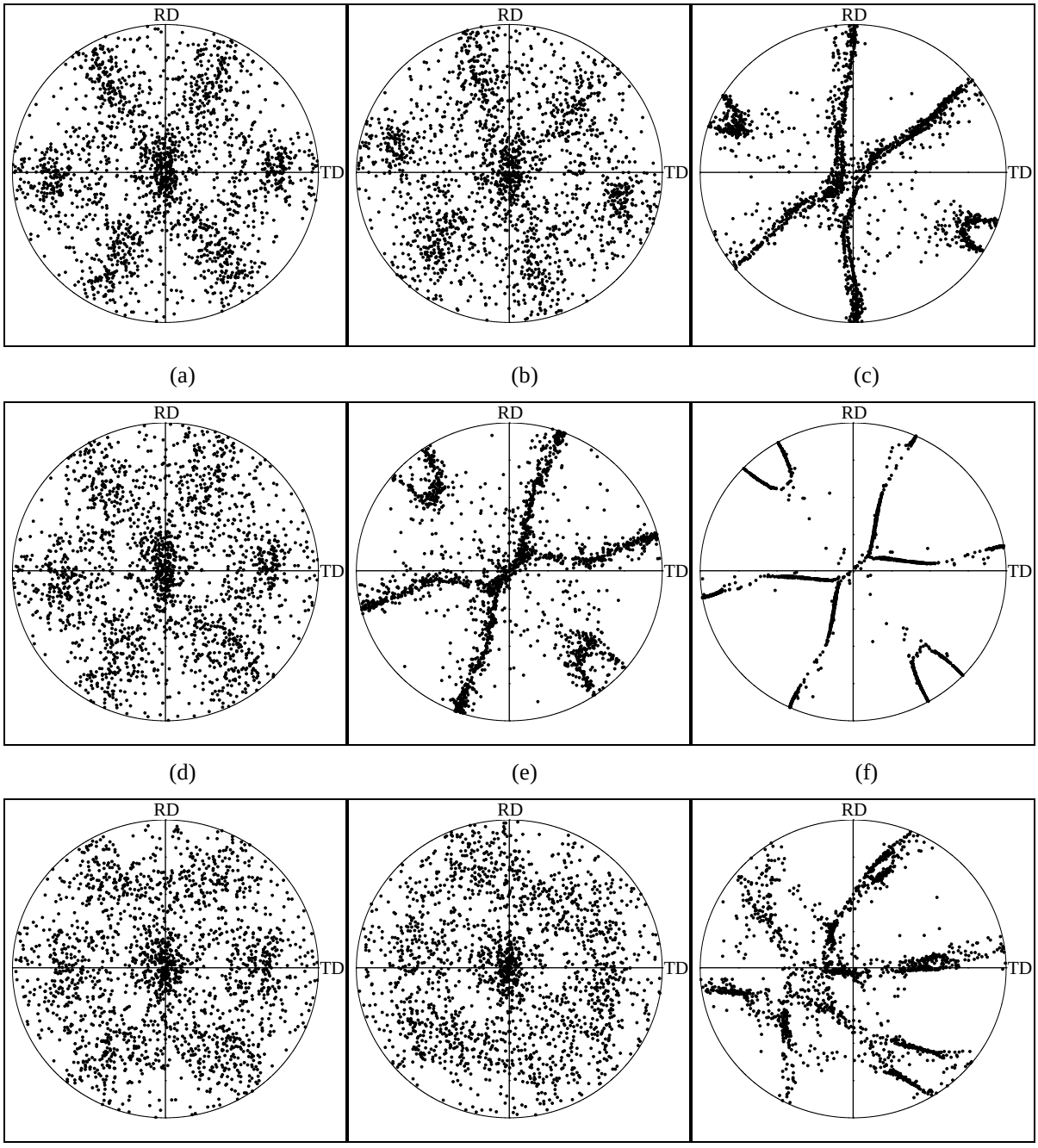


Fig. 3.41. Figures de pôle de type {111} des textures cristallographiques finales associées aux différents éléments finis : (a) Elem. A, w = 30 mm ; (b) Elem. B, w = 30 mm ; (c) Elem. C, w = 30 mm ; (d) Elem. A, w = 90 mm ; (e) Elem. B, w = 90 mm ; (f) Elem. C, w = 90 mm ; (g) Elem. A, w = 185 mm ; (h) Elem. B, w = 185 mm ; (i) Elem. C, w = 185 mm.

3.6 Conclusions

Dans ce chapitre, des outils numériques robustes, dédiés à la prédiction des déformations limites des agrégats polycristallins élastoplastiques, ont été développés. Ces outils sont basés sur un couplage entre les modèles de comportement multi-échelles présentés au Chapitre 2 et deux critères de localisation (à savoir la théorie de bifurcation et l'approche par imperfection initiale). Dans le présent chapitre, le cadre théorique ainsi que la formulation en contraintes planes de ces deux critères de localisation ont été approfondis dans un souci de cohérence avec les relations constitutives du polycristal (détaillées dans le Chapitre 2). Des aspects importants liés à la précision et à la robustesse de l'implantation numérique des deux critères de localisation ont été discutés. Le modèle de prédiction de ductilité développé a servi à déterminer les déformations limites et les CLF des tôles métalliques. À partir des résultats numériques obtenus, on peut en déduire que le schéma de transition d'échelles a une très forte influence sur la forme et le niveau des CLF prédites. D'autre part, une comparaison minutieuse entre les deux critères de localisation montre que les CLF déterminées par le critère de bifurcation constituent une borne supérieure de celles prédites par l'approche M–K. Il a été également démontré que, dans le cadre de l'approche M–K, lorsque l'imperfection initiale tend vers zéro, les CLF correspondantes tendent vers la CLF déterminée par le critère de bifurcation. Il faut noter que ces résultats importants, qui ont déjà été discutés pour le cas des modèles phénoménologiques, restent valides dans le cas des modèles multi-échelles, à savoir le modèle de Taylor–Lin et le modèle autocohérent, tel que démontré dans ce chapitre. L'effet de la texture cristallographique initiale et de la régularisation de la loi de Schmid, sur la forme et le niveau des CLF, a également été investigué. Il a été démontré que la sensibilité des déformations limites à la texture initiale est très faible dans le domaine du rétreint (où les trajets de déformation sont négatifs). Cependant, dans le domaine de l'expansion biaxiale (où les trajets de déformation sont positifs), on observe le résultat inverse. En effet, aussi bien la forme que le niveau des CLF sont très sensibles à la texture initiale. Il a été également démontré que, dans le domaine du rétreint, les CLF prédites par le critère régularisé de Schmid ont des niveaux réalistes, même si ces dernières restent plus élevées que celles prédites par le critère classique de Schmid, et cela quel que soit le modèle multi-échelles que nous avons utilisé (modèle de Taylor–Lin ou modèle autocohérent). Cependant, dans le domaine de l'expansion biaxiale, les déformations limites prédites par le critère régularisé de Schmid sont anormalement élevées, contrairement à celles obtenues par le critère classique de Schmid, qui restent réalistes. Les outils numériques développés ont été étendus à la prédiction des déformations limites des bicouches (constituées d'une couche de métal et d'une couche d'élastomère). À travers les prédictions

numériques réalisées, il a été démontré que l'ajout d'une couche d'élastomère augmente substantiellement la ductilité de la bicouche. Un autre volet des investigations menées concerne l'implantation du critère de perte d'ellipticité (ou de bifurcation) dans une subroutine UMAT pour des applications en calcul de structure avec le logiciel d'éléments finis ABAQUS/Implicit. Une telle implantation a permis de prédire l'apparition d'instabilités plastiques potentielles durant la simulation du procédé d'emboutissage.

Enfin, le présent chapitre est une compilation de plusieurs articles publiés dans des journaux à comité de lecture. Les références de ces articles sont listées ci-dessous :

- Akpama, H.K., Ben Bettaieb, M., Abed-Meraim, F., 2016. Influence of the yield surface curvature on the forming limit diagrams predicted by crystal plasticity theory. *Latin Amer. J. Solids and Structures* 13, 2231–2250.
- Akpama, H.K., Ben Bettaieb, M., Abed-Meraim, F., 2016. Ductility prediction of substrate-supported metal layers based on rate-independent crystal plasticity theory. *MATEC Web Conf.* 80, 02007.

  Akpama, H.K., Ben Bettaieb, M., Abed-Meraim, F., 2017. Localized necking predictions based on rate-independent self-consistent polycrystal plasticity: Bifurcation analysis versus imperfection approach. *Int. J. Plast.* 91, 205–237.
- Akpama, H.K., Ben Bettaieb, M., Abed-Meraim, F., 2017. Prediction of plastic instability in sheet metals during forming processes using the loss of ellipticity approach. *Latin Amer. J. Solids and Structures* 14, 1816–1836.

Conclusions et perspectives

1. Synthèse et principales contributions de l'étude

1.1. Démarche numérique proposée

Cette étude a permis de concevoir et de développer un outil numérique robuste permettant de prédire les limites de ductilité des matériaux métalliques polycristallins. La démarche adoptée est basée sur le couplage entre une modélisation multi-échelles du comportement mécanique (schéma autocohérent, modèle de Taylor–Lin) et deux critères d'instabilités plastiques (issus de la théorie de bifurcation et de l'approche d'imperfection initiale). Ainsi, les apports de cette démarche de modélisation, à dominante principalement numérique, concernent trois niveaux de modélisation différents : le monocristal, le polycristal et les instabilités plastiques.

1.2. Modélisation du comportement monocristallin

Dans le présent travail, nous avons formulé les équations constitutives du monocristal dans le cadre des grandes déformations élastoplastiques. Pour intégrer ces équations, nous avons développé deux algorithmes numériques. Le premier algorithme fait partie de la famille des algorithmes évolutifs et le second appartient à la classe des algorithmes de type retour radial (basés sur une prédiction élastique suivie d'une correction plastique). Dans un premier temps, il a été mis en évidence que les inéquations et contraintes mathématiques définissant la version classique du critère de Schmid peuvent être exprimées comme un problème de complémentarité linéaire. Ce problème de complémentarité est reformulé d'une manière équivalente sous la forme d'un système d'équations non linéaires, grâce aux fonctions de Fischer–Burmeister. Cette reformulation a permis de fusionner en une seule résolution les deux problèmes à résoudre, à savoir la prédiction des systèmes actifs et la détermination de leurs vitesses de glissement. Ceci conduit à une amélioration significative des schémas d'intégration proposés. L'algorithme évolutif a été comparé à l'algorithme de retour radial en termes de précision et d'efficacité. Nous avons montré que les deux algorithmes étaient équivalents en termes de précision, car ils permettent de prédire les mêmes résultats numériques (vitesses de glissement des systèmes actifs, courbes rhéologiques…). Cependant, l'algorithme évolutif est beaucoup plus efficace que son homologue de type retour radial, car il nécessite beaucoup moins d'itérations et de temps de calcul pour intégrer les équations constitutives. De plus, le calcul converge facilement lorsque l'algorithme évolutif est utilisé avec de grands incréments de chargement (ce que n'est pas le cas de l'algorithme de retour radial, où de sérieux problèmes de convergence peuvent être rencontrés). Compte tenu de ses bonnes performances, l'algorithme évolutif a été retenu pour l'analyse de l'effet d'une régularisation

de la loi de Schmid sur le comportement du monocristal. Il a été montré, au travers de simulations numériques variées, que cette régularisation n'impacte essentiellement que l'évolution des composantes du module tangent analytique (principalement les composantes de cisaillement). Les autres grandeurs mécaniques (vitesses de glissement, composantes de contrainte de Cauchy, …) restent quasiment insensibles à cette régularisation.

1.3. Modélisation du comportement polycristallin

Sur le plan théorique, nous avons revisité les équations gouvernant l'approche multi-échelles autocohérente dans le cadre des grandes déformations élastoplastiques. L'inconnue principale de ces équations constitutives est le module tangent macroscopique. Sur le plan numérique, une nouvelle méthode basée sur la procédure itérative de Newton–Raphson a été proposée pour calculer le module tangent macroscopique. La performance de la méthode de Newton–Raphson proposée, comparée à la méthode du point fixe qui est plus communément utilisée pour calculer le module tangent macroscopique, a été clairement mise en évidence au travers de simulations numériques variées. Par ailleurs, les simulations numériques du comportement d'agrégats polycristallins ont permis de souligner les différences entre les prédictions obtenues avec le modèle de Taylor–Lin et celles fournies par le schéma autocohérent. Sur la base de ces simulations, il apparait que le modèle de Taylor–Lin conduit à des courbes rhéologiques macroscopiques plus raides que celles obtenues avec le modèle autocohérent et que les composantes de cisaillement du module tangent macroscopique calculées avec le modèle de Taylor–Lin sont plus élevées que celles prédites par le modèle autocohérent. Plusieurs études de sensibilité ont été menées afin d'analyser l'impact de plusieurs paramètres et choix de modélisation sur la réponse mécanique d'un agrégat polycristallin. En se basant sur ces études de sensibilité, nous avons montré que la réponse macroscopique est très peu sensible au modèle d'élasticité. En revanche, l'écrouissage anisotrope, la texture cristallographique initiale, la structure cristallographique et enfin la loi d'écoulement ont une influence assez importante sur les réponses macroscopiques du matériau. Le modèle autocohérent a été implanté, sous forme d'une subroutine UMAT, dans le logiciel de calcul par éléments finis ABAQUS. Une attention particulière a été accordée, lors de cette implantation, à la détermination du module tangent cohérent (algorithmique) nécessaire pour une convergence quadratique de la méthode des éléments finis. Les résultats de cette implantation ont été illustrés au travers de la simulation d'un essai de flexion 3 points.

1.4. Modélisation des instabilités plastiques

Sur le plan théorique, nous avons reformulé l'approche de bifurcation ainsi que l'analyse d'imperfection initiale dans le cadre d'un formalisme eulérien bidimensionnel (dans lequel la bande de localisation est normale au plan de la tôle) et sous les conditions de contraintes planes. Cette formulation est la mieux adaptée pour la prédiction de la formabilité des tôles métalliques minces. Sur le plan numérique, nous avons développé, pour chacun des deux critères de localisation précédemment

cités, des schémas numériques et algorithmes permettant de prédire efficacement l'apparition de la striction localisée. Ces approches numériques ainsi développées ont été ensuite utilisées pour prédire les CLF de plusieurs matériaux. En particulier, nous avons démontré que les CLF prédites par la théorie de bifurcation constituent une borne supérieure aux CLF déterminées par l'approche d'imperfection initiale. Nous avons également démontré que les CLF issues de l'approche M–K tendent vers celles déterminées par la théorie de bifurcation lorsque le facteur d'imperfection initiale tend vers zéro. Ces résultats importants, déjà montrées dans le cadre d'approches phénoménologiques, constituent une des originalités de ce travail. Par ailleurs, les outils numériques développés ont été exploités, via des analyses de sensibilité, pour déterminer les paramètres et choix de modélisation les plus influents sur la forme et le niveau des CLF. Dans ces analyses, nous avons vérifié que le schéma de transition d'échelles a un impact non négligeable sur le niveau des déformations limites. Nous avons également étudié l'effet de la régularisation de la loi de Schmid sur les limites de formabilité prédites par la théorie de bifurcation. Cette étude a révélé qu'avec une surface de Schmid régularisée, la limite de ductilité ne peut être atteinte à des niveaux réalistes de déformation que dans le domaine du rétreint (domaine se situant entre la traction uniaxiale et la traction plane). Les outils numériques développés ont été ensuite étendus pour analyser l'impact de l'ajout d'un substrat en élastomère sur les limites de ductilité de la structure bicouche résultante (métal/élastomère). Sur la base des prédictions numériques obtenues, une amélioration notable de ductilité peut être escomptée de cette combinaison couche métallique/élastomère. Ces résultats permettent de justifier l'utilisation croissante de matériaux sous forme de bicouches métal/élastomère dans les applications industrielles récentes (circuits intégrés utilisés dans les composants électroniques, dispositifs utilisés dans des applications médicales…).

2. Perspectives

Les travaux réalisés dans le cadre de cette thèse ont permis de concevoir, développer et valider une approche théorique et numérique qui permet de prédire la striction localisée dans les matériaux métalliques. À l'issu de ce travail, de nombreuses perspectives s'ouvrent pour approfondir davantage les investigations entreprises dans le cadre de cette thèse. Certaines de ces perspectives concernent la modélisation du comportement à l'échelle du monocristal ou à l'échelle du polycristal. D'autres perspectives sont relatives quant à elles à la modélisation des instabilités plastiques.

2.1. Modélisation du comportement monocristallin

À l'échelle monocristalline, les perspectives suivantes méritent d'être explorées :

- *Modélisation du comportement des monocristaux à structure hexagonale* : les équations constitutives détaillées dans le cadre de ce travail ne sont applicables que pour les matériaux à structure cristallographique cubique (cubique centrée et cubique à faces centrées). Ces équations peuvent être étendues pour pouvoir modéliser le comportement des monocristaux à structure

cristallographique hexagonale. Cette extension permettra de prendre en compte l'évolution asymétrique de la limite d'élasticité. En effet, les matériaux hexagonaux présentent une réponse mécanique asymétrique en traction et compression. Également, le maclage doit être pris en compte, au même titre que le glissement sur les plans cristallographiques, dans la modélisation de la déformation plastique. Cette extension est indispensable car, contrairement aux matériaux cubiques, le phénomène de maclage a un effet important sur la déformation plastique des matériaux hexagonaux. Cette extension permettra certainement d'élargir les investigations précédentes pour pouvoir modéliser le comportement d'autres matériaux, comme les nouvelles générations d'alliages de titane ou de magnésium (Lebensohn et Tomé, 1993 ; Tadano et al., 2007 ; Izadbakhsh et al, 2010).

- *Intégration des effets non-Schmid dans la modélisation constitutive :* dans l'investigation actuelle, nous avons étudié l'effet d'une régularisation de la loi de Schmid sur les limites de ductilité prédites par la théorie de bifurcation. Il conviendrait d'étendre cette étude pour prendre en compte les effets non-Schmid dans la modélisation du comportement monocristallin et d'étudier l'impact de ces effets sur la forme et le niveau des CLF ainsi prédites. L'impact de ces effets en termes de réduction des déformations limites dans les monocristaux a déjà été pointé par Asaro et Rice (1977) et Steinmann et al. (1998).
- *Modélisation plus fine des mécanismes d'écrouissage :* cette perspective vise à améliorer la modélisation de l'évolution des cissions critiques en reliant explicitement ces cissions critiques à l'évolution des densités de dislocations moyennes par système de glissement. Les développements les plus récents, en termes de modélisation des mécanismes de création, de stockage et d'annihilation des dislocations, doivent être analysés pour pouvoir choisir les modèles les plus pertinents qui permettent de mieux décrire l'écrouissage monocristallin. Un enrichissement de cette description permettra sans doute d'améliorer la fiabilité des prédictions de ductilité à l'échelle du polycristal.
- *Identification plus fiable des paramètres microstructuraux :* dans cette étude, nous avons mis en évidence l'effet significatif sur la ductilité de certains paramètres microstructuraux (textures cristallographique et morphologique…). Ainsi, une prédiction plus précise de la ductilité des tôles minces passe nécessairement par une identification plus fiable et plus précise des différents paramètres microstructuraux. Dans ce cadre, les avancés les plus récentes doivent être explorées en matière de techniques expérimentales et algorithmes d'identification des paramètres matériaux. Plus concrètement, cette perspective pourrait faire l'objet d'une collaboration avec d'autres équipes de recherche (à l'échelle nationale ou internationale) spécialisées dans le domaine d'identification de paramètres.

2.2. Modélisation du comportement polycristallin

À l'échelle du polycristal, il semblerait judicieux d'explorer les pistes suivantes :

- *Développement et utilisation d'autres schémas de transition d'échelles* : en comparant les résultats obtenus avec le schéma autocohérent à ceux prédits par le modèle de Taylor–Lin, nous avons mis en évidence l'effet du schéma de transition d'échelles sur les prédictions de ductilité des matériaux polycristallins. D'autres schémas de transition d'échelles doivent être implantés et couplés aux différents critères d'instabilités plastiques pour pouvoir mieux analyser l'effet des opérations d'homogénéisation sur la prédiction de ductilité. Dans ce sens, la technique d'homogénéisation périodique semble être une piste intéressante à investiguer. En effet, cette technique permet de prendre en compte finement plusieurs aspects microstructuraux dans la modélisation du comportement d'un agrégat polycristallin, comme par exemple : des formes de grains plus réalistes, des conditions aux limites périodiques représentatives de la physique de la tôle étudiée (périodicité du réseau cristallin), les joints de grains, etc. Une fois implantée et validée, les prédictions données par cette technique d'homogénéisation doivent être comparées à celles obtenues par le modèle de Taylor–Lin et le schéma autocohérent.
- *Formulation de modèles multi-échelles pour des polycristaux plans* : dans ce travail, nous avons adopté une formulation tridimensionnelle pour modéliser le comportement à l'échelle du monocristal et à celle du polycristal. En revanche, nous avons utilisé une formulation bidimensionnelle (en contraintes planes) des critères d'instabilités (théorie de bifurcation et approche d'imperfection initiale). Pour pouvoir coupler les deux ingrédients précédemment cités, nous avons adapté les relations constitutives à l'échelle du polycristal aux conditions de contraintes planes. Cette adaptation est basée sur une condensation du module tangent macroscopique et nécessite un calcul itératif pour respecter les conditions de contraintes planes. Ce calcul itératif (qui nécessite une intégration tridimensionnelle des équations constitutives à chaque itération) ne fait qu'accroitre la complexité du problème numérique à résoudre et par conséquent augmenter le temps de calcul nécessaire pour les prédictions. Cette difficulté avait été surmontée dans la littérature en considérant des modèles monocristallins bidimensionnels (néanmoins trop simplistes), comme le modèle de 'glissement double' initialement introduit par Shalaby et Havner (1978) et Asaro (1979). Dans cette direction, nous envisageons de réécrire les équations du modèle autocohérent dans une formulation bidimensionnelle avant de coupler cette nouvelle formulation avec les différents critères d'instabilités. On peut s'inspirer pour cela des travaux d'Iwakuma et Nemat-Nasser (Iwakuma et Nemat-Nasser, 1984). Les résultats obtenus par les deux différentes formulations (tridimensionnelle, mais adaptée aux conditions de contraintes planes, et bidimensionnelle) devront alors être confrontés.

2.3. Modélisation des instabilités plastiques

En termes de modélisation des instabilités, il est important de considérer les perspectives suivantes :

- *Analyse plus approfondie de l'effet des paramètres microstructuraux sur la ductilité* : dans le présent travail, nous avons mis en évidence l'effet de plusieurs paramètres microstructuraux sur l'évolution de la ductilité. À l'état actuel de nos investigations, l'effet de chaque paramètre est étudié indépendamment des autres paramètres. Ainsi, les conclusions obtenues restent relativement partielles. Par conséquent, cette étude doit être poursuivie afin de mieux analyser ces effets et pour étudier les effets combinés (ou interactifs) des différents paramètres microstructuraux sur la prédiction de la ductilité.
- *Implantation de la technique de perturbation* : nous avons utilisé dans ce travail la théorie de bifurcation et l'approche d'imperfection initiale pour prédire les limites de ductilité. En particulier, nous avons établi le lien entre ces deux approches en montrant que les résultats obtenus par le critère de bifurcation constituent une borne supérieure vers laquelle tendent les résultats déterminés par l'approche d'imperfection initiale dans la limite d'un facteur d'imperfection tendant vers zéro. Nous suggérons de coupler l'approche micromécanique proposée à un autre critère de localisation qui est issu de l'approche de stabilité par perturbation linéarisée. Ce critère, basé sur la perte de stabilité de l'équilibre, a été couplé dans des travaux antérieurs avec des modélisations multi-échelles viscoplastiques (Dudzinski et Molinari, 1991 ; Toth et al., 1996). Dans cette perspective, nous proposons de revisiter tout d'abord les fondements théoriques sur lesquels repose cette approche. Une fois que tous les aspects théoriques sont clarifiés et maitrisés, cette méthode sera couplée au schéma autocohérent pour prédire la perte de ductilité des matériaux métalliques.
- *Modélisation de la striction diffuse* : un aspect important dans l'analyse de localisation qui est négligé dans l'investigation actuelle, comme dans la quasi-totalité des travaux de la littérature, est lié à l'effet de la striction diffuse, qui précède généralement la striction localisée, sur la prédiction de la limite de ductilité. La prise en compte de ce phénomène, qui est de nature à accélérer la localisation et donc à diminuer les niveaux prédits des limites de formage, devrait permettre des comparaisons plus cohérentes avec les résultats expérimentaux de prédiction de formabilité des tôles métalliques.

Annexe A

Intégration numérique de la loi de comportement du monocristal

A.1 Liste des systèmes de glissement

Dans cette section, nous présentons respectivement la liste des systèmes de glissement préférentiels (ou systèmes denses) des structures cristallographiques de type cubique à faces centrées et cubique centré. Comme mentionné dans la Section 1.2.2 du premier chapitre, ces systèmes sont caractérisés par les plans dans lesquels s'effectue le glissement et les directions de glissement. Les plans sont représentés par le vecteur normal $\vec{\mathbf{n}}_0^\alpha$, et les directions par le vecteur unitaire $\vec{\mathbf{m}}_0^\alpha$. Le Tab. A.1 présente la liste des systèmes de glissement de la structure cristallographique de type cubique à faces centrées (CFC) et le Tab. A.2 la liste des systèmes de glissement de la structure de type cubique centré (CC). On dénombre au total 12 systèmes de glissement pour les matériaux de type CFC et 24 pour les matériaux de type CC étudiés dans le cadre de cette thèse. En effet, dans le cas des matériaux CFC, le glissement a lieu suivant la famille de plans {111} et dans la direction de glissement <1 1 0>, alors que pour les matériaux CC, les plans de glissement sont ceux des familles {110}, {112} et les directions de glissement sont celles des familles <1 1 1>. La convention utilisée pour représenter les différents vecteurs est celle de Miller. Les vecteurs de Schmid $\vec{\mathbf{m}}_0^\alpha$ et $\vec{\mathbf{n}}_0^\alpha$ sont ainsi obtenus par normalisation des vecteurs $\vec{\mathbf{v}}_0^\alpha$ et $\vec{\mathbf{w}}_0^\alpha$, respectivement :

$$\forall \alpha = 1,\ldots,N_s : \quad \vec{\mathbf{m}}_0^\alpha = \frac{\vec{\mathbf{v}}_0^\alpha}{\left\|\vec{\mathbf{v}}_0^\alpha\right\|} \quad ; \quad \vec{\mathbf{n}}_0^\alpha = \frac{\vec{\mathbf{w}}_0^\alpha}{\left\|\vec{\mathbf{w}}_0^\alpha\right\|} \tag{A.1}$$

α	1	2	3	4	5	6
$\vec{\mathbf{v}}_0^\alpha$	[0 –1 1]	[1 0 1]	[1 1 0]	[0 –1 1]	[–1 0 1]	[1 –1 0]
$\vec{\mathbf{w}}_0^\alpha$	(–1 1 1)	(–1 1 1)	(–1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)

α	7	8	9	10	11	12
$\vec{\mathbf{v}}_0^\alpha$	[0 1 1]	[1 0 1]	[1 –1 0]	[0 1 1]	[–1 0 1]	[1 1 0]
$\vec{\mathbf{w}}_0^\alpha$	(1 1 –1)	(1 1 –1)	(1 1 –1)	(1 –1 1)	(1 –1 1)	(1 –1 1)

Tab. A.1. Liste des systèmes de glissement des matériaux à structure cubique à faces centrées (CFC).

α	1	2	3	4	5	6	7	8
$\vec{\mathbf{v}}_0^\alpha$	[1 1 1]	[1 1 1]	[1 1 1]	[1 1 1]	[1 1 1]	[1 1 1]	[–1 1 1]	[–1 1 1]
$\vec{\mathbf{w}}_0^\alpha$	(1 –1 0)	(1 0 –1)	(0 1 –1)	(1 1 –2)	(1 –2 1)	(–2 1 1)	(1 1 0)	(1 0 1)

α	9	10	11	12	13	14	15	16
$\vec{\mathbf{v}}_0^\alpha$	[–1 1 1]	[–1 1 1]	[–1 1 1]	[–1 1 1]	[1 –1 1]	[1 –1 1]	[1 –1 1]	[1 –1 1]
$\vec{\mathbf{w}}_0^\alpha$	(0 1 –1)	(1 –1 2)	(1 2 –1)	(2 1 1)	(1 1 0)	(1 0 –1)	(0 1 1)	(–1 1 2)

α	17	18	19	20	21	22	23	24
$\vec{\mathbf{v}}_0^\alpha$	[1 –1 1]	[1 –1 1]	[1 1 –1]	[1 1 –1]	[1 1 –1]	[1 1 –1]	[1 1 –1]	[1 1 –1]
$\vec{\mathbf{w}}_0^\alpha$	(1 2 1)	(2 1 –1)	(1 –1 0)	(1 0 1)	(0 1 1)	(1 1 2)	(–1 2 1)	(2 –1 1)

Tab. A.2. Liste des systèmes de glissement des matériaux à structure cubique centrée (CC).

Nous rappelons que pour des raisons purement mathématiques, les systèmes de glissement sont dédoublés afin de n'obtenir que des vitesses de glissement strictement positives ou nulles (Section 1.2.2). Ce dédoublement se fait selon la procédure suivante :

$$\forall \alpha = 1,\ldots,N_s : \quad \vec{\mathbf{m}}_0^{\alpha+N_s} = -\vec{\mathbf{m}}_0^{\alpha} \quad ; \quad \vec{\mathbf{n}}_0^{\alpha+N_s} = \vec{\mathbf{n}}_0^{\alpha} \tag{A.2}$$

À titre d'illustration, le système 13 de la structure CFC a pour direction de glissement $\left[0 \ \frac{1}{\sqrt{2}} \ \frac{-1}{\sqrt{2}}\right]$ et pour vecteur normal au plan de glissement $\left(\frac{-1}{\sqrt{3}} \ \frac{1}{\sqrt{3}} \ \frac{1}{\sqrt{3}}\right)$. Similairement, le système 25 de la structure CC a pour direction de glissement $\left[\frac{-1}{\sqrt{3}} \ \frac{-1}{\sqrt{3}} \ \frac{-1}{\sqrt{3}}\right]$ et pour vecteur normal au plan de glissement $\left(\frac{1}{\sqrt{2}} \ \frac{-1}{\sqrt{2}} \ 0\right)$.

A.2 Matrice d'interaction

La présente section est consacrée à la définition de la matrice d'interaction **a** associée aux deux matrices d'écrouissage introduites dans la Section 1.2.3 (en l'occurrence les relations (1.20) et (1.22)). En effet, la matrice **a** représente les interactions entre les dislocations des différents systèmes de

glissement et permet d'enrichir la description de l'écrouissage du matériau. Elle a différentes expressions suivant le type de structure cristallographique du matériau :

- Dans le cas des matériaux de type CFC, cette matrice est définie par quatre paramètres que nous notons a_1, a_2, a_3, a_4. Si nous désignons par α et β deux systèmes de glissement (distincts ou non), l'interaction $a^{\alpha\beta}$ entre α et β vaut :
  - a_1 lorsque α et β appartiennent au même plan de glissement ($\vec{\mathbf{n}}_0^\alpha = \vec{\mathbf{n}}_0^\beta$ ou $\vec{\mathbf{n}}_0^\alpha = -\vec{\mathbf{n}}_0^\beta$) et ont des directions de glissement colinéaires ($\vec{\mathbf{m}}_0^\alpha = \vec{\mathbf{m}}_0^\beta$ ou $\vec{\mathbf{m}}_0^\alpha = -\vec{\mathbf{m}}_0^\beta$). Ce terme représente l'auto-écrouissage du matériau.
  - a_2 lorsque α et β n'appartiennent pas au même plan de glissement mais que leurs directions de glissement sont colinéaires.
  - a_3 lorsque α et β appartiennent au même plan de glissement mais que leurs directions de glissement ne sont pas colinéaires.
  - a_4 lorsque α et β n'ont ni les mêmes plans de glissement, ni des directions de glissement colinéaires.
- Pour les matériaux de type CC, la matrice d'interaction $\mathbf{a}$ est définie par neuf paramètres notés $a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6, a_7, a_8, a_9$. Ainsi, l'interaction $a^{\alpha\beta}$ entre les systèmes α et β vaut :
  - a_1 lorsque α et β appartiennent au même plan de glissement et que ce plan de glissement est celui de la famille {110}. En plus de ces deux conditions, α et β doivent avoir des directions de glissement colinéaires. Le terme a_1 représente donc l'auto-écrouissage de la première famille de plan de glissement {110}.
  - a_2 lorsque α et β ont des plans de glissement appartenant à la famille {110} mais que ces plans sont distincts. En plus de cette condition, α et β doivent avoir des directions de glissement colinéaires.
  - a_3 lorsque α et β appartiennent au même plan de glissement et que ce dernier est de la famille {110}. En plus de cette condition, les directions de glissement des systèmes α et β doivent être distinctes.
  - a_4 lorsque α et β ont des plans de glissement distincts appartenant tous les deux à la famille {110}. En plus de cette condition, les directions de glissement de α et β doivent être également distinctes.
  - a_5 lorsque les plans de glissement des systèmes α et β appartiennent aux deux différentes familles de plan de glissement (à savoir {110} et {112}). En plus de cette condition, les directions de glissement des systèmes α et β doivent être colinéaires.

- a_6 lorsque les plans de glissement de α et β appartiennent aux deux différentes familles {110} et {112}. En plus de cette condition, les directions de glissement de α et β doivent être distinctes.
- a_7 lorsque α et β ont le même plan de glissement et que ce plan de glissement appartient à la famille {112}. De plus, α et β doivent avoir des directions de glissement colinéaires. Le terme a_7 représente ainsi l'auto-écrouissage de la famille {112}.
- a_8 lorsque les plans de glissement des systèmes α et β sont distincts et appartiennent tous les deux à la famille {112}, mais que α et β ont des directions de glissement colinéaires.
- a_9 lorsque α et β ont des plans de glissement distincts appartenant tous les deux à la famille {112}, et que les directions de glissement sont également distinctes.

Il faut également souligner le fait que la matrice d'interaction $\mathbf{a}$ est naturellement symétrique. À titre d'illustration, lorsqu'on considère la structure cristallographique de type CFC, on obtient par exemple :

$$a^{11} = a_1 \quad ; \quad a^{14} = a^{41} = a_2 \quad ; \quad a^{12} = a^{21} = a_3 \quad ; \quad a^{15} = a^{51} = a_4 \tag{A.3}$$

Lorsqu'on considère la structure cristallographique de type CC, on obtient par exemple :

$$\begin{aligned} &a^{11} = a_1 \quad ; \quad a^{12} = a^{21} = a_2 \quad ; \quad a^{1\,19} = a^{19\,1} = a_3 \quad ; \quad a^{17} = a^{71} = a_4 \quad ; \quad a^{14} = a^{41} = a_5 \\ &a^{1\,10} = a^{10\,1} = a_6 \quad ; \quad a^{44} = a_7 \quad ; \quad a^{45} = a^{54} = a_8 \quad ; \quad a^{4\,10} = a^{10\,4} = a_9 \end{aligned} \tag{A.4}$$

Par ailleurs, en raison du dédoublement des systèmes de glissement (tel que détaillé dans la Section 1.2.1), la matrice d'interaction $\mathbf{a}$ vérifie les relations suivantes :

$$\forall \alpha, \beta = 1,...,N_s : \quad a^{\alpha+N_s\,\beta} = a^{\alpha\,\beta+N_s} = a^{\alpha\,\beta} \tag{A.5}$$

A.3 Pseudo-inverse

Dans cette section, nous exposons la méthode du pseudo-inverse utilisée pour déterminer les vitesses de glissement des systèmes actifs lorsque la matrice $\mathbf{P}$ du système d'équations associé au calcul des vitesses de glissement est singulière (voir les Sections 1.2.3.1 et 13.1.2.3). Ainsi, dans un cadre général, nous présentons les différentes étapes de calcul du pseudo-inverse d'une matrice carrée $\mathbf{A}$ de dimension n. En effet, la décomposition en valeurs singulières de $\mathbf{A}$ permet d'exprimer cette dernière sous la forme suivante :

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}^T.\mathbf{S}.\mathbf{V} \tag{A.6}$$

où $\mathbf{U}$ (respectivement $\mathbf{V}$) est une matrice orthogonale dont les colonnes sont les vecteurs propres de la matrice $\mathbf{A}.\mathbf{A}^T$ (respectivement $\mathbf{A}^T.\mathbf{A}$) et $\mathbf{S}$ une matrice diagonale dont les composantes sont les

racines carrées des valeurs propres de $\mathbf{A}.\mathbf{A}^{T}$ (ou $\mathbf{A}^{T}.\mathbf{A}$). Il faut préciser que lorsque $\mathbf{A}$ est singulière, $\mathbf{S}$ comporte un ou plusieurs éléments diagonaux nuls. Ainsi, le pseudo-inverse $\mathbf{A}^{+}$ de $\mathbf{A}$ se calcule par la relation suivante :

$$\mathbf{A}^{+} = \mathbf{V}^{T}.\mathbf{S}^{+}.\mathbf{U} \tag{A.7}$$

où $\mathbf{S}^{+}$ est le pseudo-inverse de $\mathbf{S}$ et se définit comme suit :

$$\forall\, i = 1,...,n : \quad S_{ii}^{+} = \begin{cases} 1/S_{ii} \text{ si} & S_{ii} > 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{A.8}$$

Lorsque $\mathbf{A}$ est inversible, le pseudo-inverse de $\mathbf{A}$ est naturellement égal à l'inverse de $\mathbf{A}$.

A. 4 Exponentiel d'une matrice antisymétrique

Cette section est dédiée au calcul de l'exponentiel d'une matrice carrée antisymétrique. En effet, comme détaillé dans la relation (1.58) de la Section 1.3, l'intégration des équations constitutives du monocristal nécessite l'actualisation du tenseur de rotation $\mathbf{r}$ du réseau cristallographique. Cette actualisation passe par le calcul de l'exponentiel d'un tenseur antisymétrique représentant l'incrément de rotation élastique. Le langage FORTAN90 utilisé pour développer le code de calcul présenté dans ce manuscrit offre un gain de temps d'exécution substantiel par rapport aux autres langages de calcul scientifique (comme MATLAB ou MATHEMATICA). Cependant, contrairement à ces derniers, certaines fonctions mathématiques comme le calcul de l'exponentiel d'une matrice ne sont pas prédéfinies et requièrent un codage explicite de la part de l'utilisateur. Nous désignerons par $\mathbf{w}$ une matrice carrée antisymétrique de dimension 3 et par $\mathbf{exp}(\mathbf{w})$ l'exponentiel de cette matrice.

$\mathbf{w}$ étant une matrice antisymétrique, elle s'exprime sous la forme suivante :

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} 0 & w_{12} & w_{13} \\ -w_{12} & 0 & w_{23} \\ -w_{13} & -w_{23} & 0 \end{pmatrix} \tag{A.9}$$

De la relation (A.9), on déduit que les valeurs propres de $\mathbf{w}$ sont respectivement 0, $-i\alpha$ et $i\alpha$ où i est l'unité imaginaire ($i^2 = -1$) et α le réel qui vaut $\sqrt{(w_{12})^2 + (w_{13})^2 + (w_{23})^2}$. En notant $\mathbf{P}$ la matrice de passage dans la base des vecteurs propres de $\mathbf{w}$, nous obtenons la relation suivante :

$$\mathbf{w} = \mathbf{P}.\mathrm{Diag}(0, -i\alpha, i\alpha).\mathbf{P}^{-1} \tag{A.10}$$

où $\mathrm{Diag}(0, -i\alpha, i\alpha)$ est la matrice diagonale dont les éléments sont les valeurs propres de $\mathbf{w}$.

L'équation (A.10) peut être réécrite sous la forme :

$$\begin{aligned} \mathbf{w} &= 0\left(\mathbf{P}.\mathrm{Diag}(1,0,0).\mathbf{P}^{-1}\right) - i\alpha\left(\mathbf{P}.\mathrm{Diag}(0,1,0).\mathbf{P}^{-1}\right) + i\alpha\left(\mathbf{P}.\mathrm{Diag}(1,0,0).\mathbf{P}^{-1}\right) \\ &= -i\alpha\,\mathbf{P}_1 + i\alpha\,\mathbf{P}_2 \end{aligned} \tag{A.11}$$

où $\mathbf{P}_1$ et $\mathbf{P}_2$ sont les projecteurs sur les sous-espaces propres associés respectivement à $-\mathrm{i}\alpha$ et $\mathrm{i}\alpha$. Similairement à l'équation (A.11), on peut exprimer, pour tout entier naturel k, $\mathbf{w}^k$ en fonction des projecteurs $\mathbf{P}_1$ et $\mathbf{P}_2$. On obtient :

$$\begin{aligned}\mathbf{w}^k &= \mathbf{P}.\mathrm{Diag}\left(0, (-\mathrm{i}\alpha)^k, (\mathrm{i}\alpha)^k\right).\mathbf{P}^{-1} \\ &= 0\left(\mathbf{P}.\mathrm{Diag}(1,0,0).\mathbf{P}^{-1}\right) + (-\mathrm{i}\alpha)^k\left(\mathbf{P}.\mathrm{Diag}(0,1,0).\mathbf{P}^{-1}\right) + (\mathrm{i}\alpha)^k\left(\mathbf{P}.\mathrm{Diag}(0,0,1).\mathbf{P}^{-1}\right) \\ &= (-\mathrm{i}\alpha)^k\,\mathbf{P}_1 + (\mathrm{i}\alpha)^k\,\mathbf{P}_2\end{aligned} \tag{A.12}$$

Par ailleurs, les projecteurs $\mathbf{P}_1$ et $\mathbf{P}_2$ peuvent être exprimés en fonction de $\mathbf{w}$. En effet, la relation (A.12) implique que :

$$\begin{cases} -\mathrm{i}\alpha\,\mathbf{P}_1 + \mathrm{i}\alpha\,\mathbf{P}_2 = \mathbf{w} \\ -\alpha^2\,\mathbf{P}_1 - \alpha^2\,\mathbf{P}_2 = \mathbf{w}^2 \end{cases} \tag{A.13}$$

De l'équation (A.13), on déduit les relations suivantes :

$$\mathbf{P}_1 = -\frac{1}{2\alpha^2}\mathbf{w}^2 + \frac{\mathrm{i}}{2\alpha}\mathbf{w} \quad ; \quad \mathbf{P}_2 = -\frac{1}{2\alpha^2}\mathbf{w}^2 - \frac{\mathrm{i}}{2\alpha}\mathbf{w} \tag{A.14}$$

À présent, nous pouvons calculer l'exponentiel de $\mathbf{w}$. En effet, cette fonction est définie sous la forme suivante :

$$\mathbf{exp}(\mathbf{w}) = \mathbf{I}_2 + \sum_{k=1}^{\infty}\frac{\mathbf{w}^k}{k!} \tag{A.15}$$

En insérant la relation (A.12) dans l'équation (A.15), on obtient :

$$\mathbf{exp}(\mathbf{w}) = \mathbf{I}_2 + \left(\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-\mathrm{i}\alpha)^k}{k!}\right)\mathbf{P}_1 + \left(\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(\mathrm{i}\alpha)^k}{k!}\right)\mathbf{P}_2 = \mathbf{I}_2 + \left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha} - 1\right)\mathbf{P}_1 + \left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} - 1\right)\mathbf{P}_2 \tag{A.16}$$

En remplaçant dans la relation (A.16) $\mathbf{P}_1$ et $\mathbf{P}_2$ par leurs expressions respectives données dans l'équation (A.14), on obtient l'expression finale de $\mathbf{exp}(\mathbf{w})$:

$$\mathbf{exp}(\mathbf{w}) = \mathbf{I}_2 + \left(\frac{1-\cos\alpha}{\alpha^2}\right)\mathbf{w}^2 + \left(\frac{\sin\alpha}{\alpha}\right)\mathbf{w} \tag{A.17}$$

avec

$$\mathbf{w}^2 = \begin{pmatrix} -(w_{12})^2 - (w_{13})^2 & -w_{13}w_{23} & w_{12}w_{23} \\ -w_{13}w_{23} & -(w_{12})^2 - (w_{23})^2 & -w_{12}w_{13} \\ w_{12}w_{23} & -w_{12}w_{13} & -(w_{13})^2 - (w_{23})^2 \end{pmatrix} \tag{A.18}$$

Lorsque $\mathbf{w}$ est une matrice nulle, $\mathbf{exp}(\mathbf{w})$ vaut la matrice identité $\mathbf{I}_2$.

Annexe B

Intégration numérique de la loi de comportement du polycristal

B.1 Approximation numérique du tenseur d'interaction

Nous proposons dans cette section une approximation du tenseur d'interaction $\bar{\mathbf{T}}^{II}$ basée sur la quadrature de Gauss–Legendre. En effet, la valeur exacte du tenseur d'interaction est complexe à déterminer analytiquement et l'approximation de Gauss est utilisée pour obtenir une valeur approchée de ce tenseur. Nous rappelons que ce tenseur d'interaction est défini par la formule suivante (la même que l'équation (2.64)) :

$$\forall m,n,i,j=1,2,3: \quad \bar{T}^{II}_{mnij} = -\frac{a^I b^I c^I}{4\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} C^{-1}_{jm}\,\frac{\chi_i\,\chi_n}{r^3}\sin\theta\,d\theta\,d\varphi \tag{B.1}$$

Sans perte de généralité, nous exprimerons les composantes du tenseur d'interaction $\bar{\mathbf{T}}^{II}$ sous la forme suivante :

$$\forall m,n,i,j=1,2,3: \quad \bar{T}^{II}_{mnij} = -\frac{a^I b^I c^I}{4\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} f_{mnij}(\theta,\varphi)\,d\theta\,d\varphi \tag{B.2}$$

Pour calculer $\bar{\mathbf{T}}^{II}$, les intervalles $[0,\pi]$ et $[0,2\pi]$ sont partitionnés en 2 et 4 sous-intervalles, respectivement, de longueur $\frac{\pi}{2}$ chacun :

$$[0,\pi] = \bigcup_{p=0}^{1}\left[\frac{p\pi}{2},\frac{(p+1)\pi}{2}\right] \quad ; \quad [0,2\pi] = \bigcup_{q=0}^{3}\left[\frac{q\pi}{2},\frac{(q+1)\pi}{2}\right] \tag{B.3}$$

En utilisant la relation (B.3), l'équation (B.2) devient alors :

$$\forall m,n,i,j=1,2,3:\quad \bar{T}^{II}_{mnij}=-\frac{a^I b^I c^I}{4\pi}\sum_{p=0}^{1}\sum_{q=0}^{3}\int_{\frac{p\pi}{2}}^{\frac{(p+1)\pi}{2}}\int_{\frac{q\pi}{2}}^{\frac{(q+1)\pi}{2}} f_{mnij}(\theta,\varphi)\,d\theta\,d\varphi \tag{B.4}$$

En effectuant le changement de variable suivant :

$$\begin{cases} x=\dfrac{4}{\pi}\theta-(1+2p) \\ y=\dfrac{4}{\pi}\varphi-(1+2q) \end{cases} \tag{B.5}$$

le tenseur d'interaction vérifie finalement la relation :

$$\forall m,n,i,j=1,2,3:\quad \bar{T}^{II}_{mnij}=-\frac{a^I b^I c^I \pi}{4^3}\sum_{p=0}^{1}\sum_{q=0}^{3}\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} f_{mnij}\left(\frac{\pi}{4}\left[x+(1+2p)\right],\frac{\pi}{4}\left[y+(1+2q)\right]\right)dx\,dy \tag{B.6}$$

La règle de quadrature de Gauss–Legendre (Loxan et al., 1942) est ensuite utilisée pour déterminer une valeur approchée de $\bar{\mathbf{T}}^{II}$ à partir de l'équation (B.6). Dans notre étude, 4 points de Gauss ont été utilisés.

B.2 Définition des opérateurs tensoriels relatifs au schéma autocohérent

Afin de déterminer l'expression de la matrice jacobienne du système formé par les équations non-linéaires du schéma autocohérent, certains opérateurs tensoriels ont été introduits. Cette section a pour objectif d'expliciter la forme analytique de ces différents opérateurs.

B.2.1 Propriétés de l'opérateur isomorphe

Dans la Section 2.3.1, un opérateur isomorphe $\mathcal{B}$ défini de l'espace des tenseurs d'ordre 4 sur $\mathbb{R}^3$ (noté $\boldsymbol{E}$) vers l'espace des tenseurs d'ordre 2 sur $\mathbb{R}^9$ (noté $\boldsymbol{F}$) a été introduit afin de résoudre les équations fortement non-linéaires du schéma autocohérent par la méthode itérative de Newton–Raphson. Cet opérateur isomorphe vérifie certaines propriétés que nous rappelons dans les relations ci-dessous :

$$\forall \mathbf{a},\mathbf{b}\in \boldsymbol{E}:\quad \begin{cases} \mathcal{B}(\mathbf{a}+\mathbf{b})=\mathcal{B}(\mathbf{a})+\mathcal{B}(\mathbf{b}) \\ \mathcal{B}(\mathbf{a}:\mathbf{b})=\mathcal{B}(\mathbf{a}).\mathcal{B}(\mathbf{b}) \end{cases} \tag{B.7}$$

Dans cette section, nous démontrons les relations (B.7)$_{(1)}$ et (B.7)$_{(2)}$. La relation (B.7)$_{(1)}$ s'obtient par calcul direct. En effet,

$$\forall \mathbf{a},\mathbf{b}\in \boldsymbol{E}\quad ;\quad \forall i,j,k,l=1,...,3:\quad (\mathbf{a}+\mathbf{b})_{ijkl}=a_{ijkl}+b_{ijkl} \tag{B.8}$$

Par ailleurs, pour chacun des couples (i, j) et (k, l), il existe deux entiers m_0 et n_0 déterminés de façon unique et vérifiant la relation

$$\tau(m_0)=(i,j)\quad ;\quad \tau(n_0)=(k,l) \tag{B.9}$$

L'équation (B.8) peut donc se réécrire sous la forme :

$$\forall \mathbf{a},\mathbf{b} \in \boldsymbol{E} \quad ; \quad \forall m_0, n_0 = 1,...,9 : \quad (\mathbf{a}+\mathbf{b})_{\tau(m_0)\tau(n_0)} = a_{\tau(m_0)\tau(n_0)} + b_{\tau(m_0)\tau(n_0)} \tag{B.10}$$

On peut ainsi remarquer que l'équation (B.10) n'est que la forme indicielle de la relation (B.7)$_{(1)}$. On peut démontrer la relation (B.7)$_{(2)}$ en effectuant une démarche similaire à celle de l'équation (B.7)$_{(1)}$. En effet,

$$\forall \mathbf{a},\mathbf{b} \in \boldsymbol{E} \quad ; \quad \forall i,j,k,l = 1,...,3 : \quad (\mathbf{a}:\mathbf{b})_{ijkl} = a_{ijmn} b_{mnkl} \quad ; \quad m,n = 1,...,3 \tag{B.11}$$

Pour chaque couple (i,j), (k,l) et (m,n), il existe trois entiers p_0, q_0 et r_0 déterminés de façon unique et vérifiant la relation :

$$\tau(p_0) = (i,j) \quad ; \quad \tau(q_0) = (k,l) \quad ; \quad \tau(r_0) = (m,n) \tag{B.12}$$

En insérant la relation (B.12) dans l'équation (B.11), on obtient :

$$\forall \mathbf{a},\mathbf{b} \in \boldsymbol{E} \quad ; \quad \forall p_0, q_0 = 1,...,9 : \quad (\mathbf{a}:\mathbf{b})_{\tau(p_0)\tau(q_0)} = a_{\tau(p_0)\tau(r_0)} b_{\tau(r_0)\tau(q_0)} \quad ; \quad r_0 = 1,...,9 \tag{B.13}$$

L'équation (B.13) représente la forme indicielle de l'équation (B.7)$_{(2)}$.

B.2.2 Inverse de l'opérateur isomorphe

Dans cette section, nous donnons l'expression analytique de l'inverse de l'opérateur isomorphe $\mathcal{B}$ introduit dans la Section 2.3.1. Nous désignerons par $\mathcal{B}^{-1}$ l'inverse de $\mathcal{B}$. Ainsi $\mathcal{B}^{-1}$ est défini de l'espace des tenseurs d'ordre 2 sur $\mathbb{R}^9$ (noté $\boldsymbol{F}$) vers celui des tenseurs d'ordre 4 sur $\mathbb{R}^3$ et vérifie :

$$\forall \mathbf{a} \in \boldsymbol{F} \quad ; \quad \forall i,j,k,l = 1,...,3 : \quad \left(\mathcal{B}^{-1}(\mathbf{a})\right)_{ijkl} = a_{\tau'(i,j)\tau'(k,l)} \tag{B.14}$$

où τ' est une application définie de l'ensemble $\{1,2,3\} \times \{1,2,3\}$ vers l'ensemble $\{1,2,3,...,9\}$ tel que :

$$\begin{aligned} &\tau'(1,1) = 1 \quad ; \quad \tau'(1,2) = 2 \quad ; \quad \tau'(1,3) = 3 \\ &\tau'(2,1) = 4 \quad ; \quad \tau'(2,2) = 5 \quad ; \quad \tau'(2,3) = 6 \\ &\tau'(3,1) = 7 \quad ; \quad \tau'(3,2) = 8 \quad ; \quad \tau'(3,3) = 9 \end{aligned} \tag{B.15}$$

B.2.3 Forme analytique des opérateurs tensoriels

Cette section est consacrée à la détermination des opérateurs tensoriels utilisés dans le schéma autocohérent. Il s'agit de l'opérateur $\mathcal{C}_1$ utilisé dans la relation (2.75), de l'opérateur $\mathcal{C}_2$ utilisé dans la relation (2.75) et de l'opérateur $\mathcal{D}$ utilisé dans la relation (2.81).

- $\mathcal{C}_1$ est défini par la relation suivante :

$$\forall \mathbf{x},\mathbf{y} \in \boldsymbol{F} : \quad \mathbf{x}.\mathbf{y} = \mathcal{C}_1(\mathbf{x}):\mathbf{y} \tag{B.16}$$

D'après l'équation (B.16), on peut remarquer que $\mathcal{C}_1$ est un tenseur d'ordre 4 sur $\mathbb{R}^9$. Par définition du produit contracté de deux tenseurs, on peut écrire :

$$\begin{aligned} \forall\, i,j = 1,2,...,9 : \quad (\mathbf{x}.\mathbf{y})_{ij} &= x_{ik} y_{kj} = x_{ik} \delta_{km} \delta_{jn} y_{mn} = x_{im} \delta_{jn} y_{mn} \\ &= \mathcal{C}_1(\mathbf{x})_{ijmn}\, y_{mn} \qquad ; \qquad m,n = 1,2,...,9 \end{aligned} \tag{B.17}$$

- $\mathcal{C}_2$ est défini par la relation suivante :

$$\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \boldsymbol{F} : \quad \mathbf{y} \,.\, \mathbf{x} = \mathcal{C}_2(\mathbf{x}) : \mathbf{y} \tag{B.18}$$

$\mathcal{C}_2$ est également un tenseur d'ordre 4 sur $\mathbb{R}^9$. Une démarche similaire à celle de la relation (B.17) donne :

$$\begin{aligned} \forall\, i, j = 1,2,...,9 : \quad (\mathbf{y} \,.\, \mathbf{x})_{ij} &= y_{ik} x_{kj} = x_{kj} \delta_{im} \delta_{kn} y_{mn} = x_{nj} \delta_{im} y_{mn} \\ &= \mathcal{C}_2(\mathbf{x})_{ijmn}\, y_{mn} \qquad ; \qquad m, n = 1,2,...,9 \end{aligned} \tag{B.19}$$

- $\mathcal{D}$ est défini par la relation suivante :

$$\forall \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \in \boldsymbol{F} : \quad \mathbf{x} \,.\, \mathbf{y} \,.\, \mathbf{z} = \mathcal{D}(\mathbf{x}, \mathbf{z}) : \mathbf{y} \tag{B.20}$$

L'expression analytique de $\mathcal{D}$ s'obtient par un calcul direct du produit $\mathbf{x} \,.\, \mathbf{y} \,.\, \mathbf{z}$. En effet,

$$\begin{aligned} \forall\, i, j = 1,2,...,9 : \quad (\mathbf{x} \,.\, \mathbf{y} \,.\, \mathbf{z})_{ij} &= x_{ik} y_{kl} z_{lj} = x_{ik} z_{lj} y_{kl} \\ &= \mathcal{D}(\mathbf{x}, \mathbf{z})_{ijkl}\, y_{kl} \qquad ; \qquad k, l = 1,2,...,9 \end{aligned} \tag{B.21}$$

Références bibliographiques

Akpama, H.K., Ben Bettaieb, M., Abed-Meraim, F., 2016. Influence of the yield surface curvature on the forming limit diagrams predicted by crystal plasticity theory. *Latin Amer. J. Solids and Structures* 13, 2231–2250.

Akpama, H.K., Ben Bettaieb, M., Abed-Meraim, F., 2016. Ductility prediction of substrate-supported metal layers based on rate-independent crystal plasticity theory. *MATEC Web Conf.* 80, 02007.

Akpama, H.K., Ben Bettaieb, M., Abed-Meraim, F., 2016. Numerical integration of rate-independent BCC single crystal plasticity models: comparative study of two classes of numerical algorithms. *Int. J. Num. Meth. Eng*. 108, 363–422.

Akpama, H.K., Ben Bettaieb, M., Abed-Meraim, F., 2017. Localized necking predictions based on rate-independent self-consistent polycrystal plasticity: Bifurcation analysis versus imperfection approach. *Int. J. Plast.* 91, 205–237.

Akpama, H.K., Ben Bettaieb, M., Abed-Meraim, F., 2017. Prediction of the ductility limit of sheet metals during forming operations by using the loss of ellipiticity approach. *Latin Amer. J. Solids and Structures*, doi : http://dx.doi.org/10.1590/1679–78253544.

Alaca, B.E., Saif, M.T.A., Sehitoglu, H., 2002. On the interface debond at the edge of a thin film on a thick substrate. *Acta Mater.* 50(5), 1197–1209.

Amirkhizi, A.V., Isaacs, J., McGee, J., Nemat-Nasser, S., 2006. An experimentally-based viscoelastic constitutive model for polyurea, including pressure and temperature effects. *Philos. Mag.* 86(36), 5847–5866.

Anand, L., Kalidindi, S.R., 1994. The process of shear band formation in plane strain compression of fcc metals: effects of crystallographic texture. *Mech. Mater*. 17, 223–243.

Anand, L., Kothari, M., 1996. A computational procedure for rate-independent crystal plasticity. *J. Mech. Phys. Solids* 44, 525–558.

Asaro, R.J., Rice, J.R., 1977. Strain localization in ductile single crystals. *J. Mech. Phys. Solids* 25, 309–338.

Asaro, R.J., 1979. Geometrical effects in the inhomogeneous deformation of ductile single crystals. *Acta Metall.*, 27, 445–453.

Asaro, R.J., 1983. Micromechanics of crystals and polycrystals. *Adv. Appl. Mech*. 23, 1–115.

Asaro, R.J., 1983. Crystal plasticity. *ASME J. Appl. Mech*. 50, 921–934.

Asaro, R.J., Needleman, A., 1985. Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals. *Acta Metall*. 33, 923–953.

Barlat, F., 1987. Crystallographic texture, anisotropic yield surfaces and forming limits of sheet metals. *Mater. Sci. Eng*. 91, 55–72.

Ben Bettaieb, M., 2006. Modélisation numérique du comportement de matériaux polycristallins par homogénéisation périodique. *Thèse de doctorat, Université de la Méditerranée*.

Ben Bettaieb, M., Debordes, O., Dogui, A., Duchêne, L., Keller, C., 2012. On the numerical integration of rate independent single crystal behavior at large strain. *Int. J. Plast*. 32/33, 184–217.

Ben Bettaieb, M., Abed-Meraim, F., 2015. Investigation of localized necking in substrate-supported metal layers: comparison of bifurcation and imperfection analyses. *Int. J. Plast*. 65, 168–190.

Bertinetti, M.A., Schwindt, C.D., Signorelli, J.W., 2014. Effect of the cube orientation on formability for FCC materials: A detailed comparison between full-constraint and self-consistent predictions. *Int. J. Mech. Sci*. 87, 200–217.

Berveiller, M., Zaoui, A., 1979. An extension of the self-consistent scheme to plastically flowing polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids* 26, 325.

Berveiller, M., Fassi-Fehri, O., Hihi, A., 1987. The problem of two plastic and heterogeneous inclusions in an anisotropic medium. *Int. J. Engng Sci*. 25(6), 691–709.

Bishop, J.F.H., Hill, R., 1951. A theory of the plastic distortion of a polycrystalline aggregate under combined stress. *Philos. Mag*. 42, 414.

Borja, R.I., Wren, J.R., 1993. Discrete micromechanics of elastoplastic crystals, *Int. J. Num. Meth. Eng*. 36, 3815–3840.

Boudeau, N., Gelin, J.C., Salhi, S., 1998. Computational prediction of the localized necking in sheet forming based on microstructural material aspects. *Comp. Mater. Sci*. 11, 45–64.

Brenner, R., Lebensohn, R.A., Castelneau, O., 2009. Elastic anisotropy and yield surface estimates of polycrystals. *Int. J. Solids. Struct*. 46(16), 3018–3026.

Budiansky, B., Hashin, Z., Sanders, J.L., 1960. The stress field of a slipped crystal and the early plastic behavior of polycristalline material plasticity. In: *Proceedings of the Symposium Naval Struct. Mech., Pergamon, Oxford*, 239–258.

Budiansky, B., Wu, 1962. Theoretical prediction of plastic strains of polycrystals. In: *Proc. of the 4th U.S. National Congress of Applied Mechanics, ASME*, 1175.

Cao, J., Yao, H., Karafillis, A., Boyce, M.C., 2000. Prediction of localized thinning in sheet metal using a general anisotropic yield criterion. *Int. J. Plast*. 16, 1105–1129.

Castelnau, O., Brenner, R., Lebensohn, R.A., 2006. The effect of strain heterogeneity on the work hardening of polycrystals predicted by mean-field approaches. *Acta Mater*. 54(10), 2745–2756.

Chalal, H., Abed-Meraim, F., 2015. Hardening effects on strain localization predictions in porous ductile materials using the bifurcation approach. *Mech. Mater*. 91, 152–166.

Chiu, S.L., Leu, J., Ho, P.S., 1994. Fracture of metal–polymer line structures. I. Semiflexible polyimide. *J. Appl. Phys*. 76, 5136–5142.

Cuitino, A., Ortiz, M., 1992. Computational Modelling of single crystals. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng*. 1, 225–263.

Dederichs, P.H., Zeller, R., 1973. Variational treatment of the elastic constants of disordered materials. *Z. Phys. A-Hadron Nucl*. 259(2), 103–116.

Dudzinski, D., Molinari, A., 1991. Perturbation analysis of thermoplastic instabilities in biaxial loading. *Int. J. Solids Struct.* 27(5), 601–628.

Eimer, C., 1967. Stresses in multi-phase media. *Archiwum mechaniki stosowanej* 19(4), 521–536.

Fassi-Fehri, O., 1985. Le problème de la paire d'inclusions plastiques et hétérogènes dans une matrice anisotrope – Application à l'étude du comportement des matériaux composites et de la plasticité. *Thèse de doctorat, Université de Metz*.

Fortunier, R., 1989. Dual potentials and extremum work principles in single-crystal plasticity. *J. Mech. Phys. Solids* 37, 779–790.

Francoisi, P., 1984. Étude théorique et expérimentale du comportement élastoplastique de monocristaux métalliques se déformant par glissement : Modélisation pour un chargement complexe quasi-statique. *Thèse de doctorat, Université de Paris Nord*.

Franz, G., 2008. Prédiction de la limite de formabilité des aciers multiphasés par une approche micromécanique. *Thèse de doctorat, Arts et Métiers ParisTech*.

Franz, G., Abed-Meraim, F., Lorrain, J.P., Ben Zineb, T., Lemoine, X., Berveiller, M., 2009a. Ellipticity loss analysis for tangent moduli deduced from a large strain elastic–plastic self-consistent model. *Int. J. Plast*. 25, 205–238.

Franz, G., Abed-Meraim, F., Ben Zineb, T., Lemoine, X., Berveiller, M., 2009b. Strain localization analysis using a multiscale model. *Comp. Mater. Sci*. 45, 768–773.

Franz, G., Abed-Meraim, F., Berveiller, M., 2013. Strain localization analysis for single crystals and polycrystals: Towards microstructure–ductility linkage. *Int. J. Plast*. 48, 1–33.

Galan, J., Verleysen, P., Lebensohn, R.A., 2014. An improved algorithm for the self-consistent model and its integration with implicit finite element schemes. *Modelling Simul. Mater, Sci. Eng*. 22 (5), 055023.

Gambin, W., 1991. Plasticity of crystals with interacting slip systems. *Engineering Transactions* 39(3/4), 303–324.

Gambin, W., 1992. Refined analysis of elastic plastic crystals. *Int. J. Solids. Struct.* 29, 2013–2021.

Gambin, W., Barlat, F., 1997. Modeling of deformation texture development based on rate independent crystal plasticity. *Int. J. Plast*. 13, 75–85.

Ghosh, A.K., 1977. Tensile instability and necking in materials with strain hardening and strain-rate hardening. *Acta Metall*. 25, 1413–1424.

Goodwin, G.M., 1968. Application of strain analysis to sheet metal forming problems in press shop. *Metallurgica Italiana* 60(8), 767–744.

Haddag, B., Abed-Meraim, F., Balan, T., 2009. Strain localization analysis using a large deformation anisotropic elastic–plastic model coupled with damage. *Int. J. Plast*. 25, 1970–1995.

Hershey, A.V., 1954. The elasticity of an isotropic aggregate of anisotropic cubic crystals. *J. Appl. Mech*. 21(3), 236–240.

Hill, R., 1952. On discontinuous plastic states, with special reference to localized necking in thin sheets. *J. Mech. Phys. Solids* 1, 19–30.

Hill, R., 1965a. Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids* 13, 89–101.

Hill, R., 1965b. A self-consistent mechanics of composite materials. *J. Mech. Phys. Solids* 13, 213–221.

Hill, R., 1966. Generalized constitutive relations for incremental deformation of metal crystals for multislip. *J. Mech. Phys. Solids* 14, 95–102.

Hill, R., Rice, J.R., 1972. Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain. *J. Mech. Phys. Solids* 20, 401–413.

Hoc, T., 1999. Études expérimentale et numérique de la localisation de la déformation dans un acier doux. *Thèse de doctorat, École Centrale de Paris*.

Hommel, M., Kraft, O., 2001. Deformation behavior of thin copper films on deformable substrates. *Acta Mater*. 49(19), 3935–3947.

Hunter, S.C., 1979. Some exact solutions in the theory of finite elasticity for incompressible neo-Hookean materials. *Int. J. Mech. Sci*. 21(4), 203–211.

Hutchinson, J.W., 1970. Elastic plastic behaviour of polycrystalline metals and composites. *Proc. R. Soc. Lond*. A 319, 247–272.

Hutchinson, J.W., 1976. Bounds and Self-Consistent Estimates for Creep of Polycrystalline Materials. *Proc. R. Soc. Lond*. A 348, 101–127.

Hutchinson, J.W., Neale, K.W., Needleman, A., 1978a. Sheet necking-I. Validity of plane stress assumptions of the long-wavelength approximation. In: Koistinen, D.P., Wang, N.M. (Eds.), *Mechanics of Sheet Metal Forming*. Plenum, 111–126.

Hutchinson, J.W., Neale, K.W., 1978b. Sheet necking-II. Time-independent behavior. In: Koistinen, D.P., Wang, N.M. (Eds.), *Mechanics of Sheet Metal Forming*. Plenum, 127–153.

Hutchinson, J.W., Neale, K.W., 1978c. Sheet necking-III. Strain-rate effects. In: Koistinen, D.P., Wang, N.M. (Eds.), *Mechanics of Sheet Metal Forming*. Plenum, 269–285.

Inal, K., Neale, K.W., Aboutajeddine A., 2005. Forming limit comparisons for FCC and BCC sheets. *Int. J. Plast*. 1255–1266.

Iwakuma, T., Nemat-Nasser, S., 1984. Finite elastic–plastic deformation of polycrystalline metals. *Proc. R. Soc. Lond*. A 394, 87–119.

Izadbakhsh, A., Inal, K., Mishra, R.K. 2010. Numerical formability assessment in single crystals of magnesium. *Comp. Mater. Sci*. 50(2), 571–585.

Kalidindi, S.R., Bronkhorst, C.A., Anand, L., 1992. Crystallographic texture evolution during bulk deformation processing of fcc metals. *J. Mech. Phys. Solids* 40, 537–569.

Kami, A., Dariani, B.M., Vanini, A.S., Comsa, D.S., Banabic, D., 2015. Numerical determination of the forming limit curves of anisotropic sheet metals using GTN damage model. *J. Mater. Proc. Tech*. 216, 472–483.

Keeler, S.P., Backofen, W.A., 1963. Plastic instability and fracture in sheets stretched over rigid punches. *Trans. ASM*. 56, 25–48.

Khan, A.S., Baig, M., 2011. Anisotropic responses, constitutive modeling and the effects of strain-rate and temperature on the formability of an aluminum alloy. *Int. J. Plast*. 27, 522–538.

Kim, J.H., Lee, M.-G., Kim, D., Barlat, F., 2013. Numerical procedures for predicting localization in sheet metals using crystal plasticity. *Comp. Mater. Sci*. 72, 107–115.

Knockaert, R., Chastel, Y., Massoni, E., 2002. Forming limits predictions using rate-independent polycrystalline plasticity. *Int. J. Plast*. 18, 231–247.

Kobayashi, M., Mukai, M., Takahashi, H., Ohno, N., Kawakami, T., Ishikawa, T., 2003. Implicit integration and consistent tangent modulus of a time-dependent non-unified constitutive model. *Int. J. Numer. Meth. Eng*. 58, 1523–1543.

Kocks, U.F., 1976. Laws for work-hardening and low-temperature creep. *J. Eng. Mat. Tech. ASME*. 98, 76–85.

Kröner, E., 1958. Berechnung der elastischen Konstanten des Vielkristalls aus den Konstanten des Einkristalls. *Z. Physik*. 151, 504–518.

Kröner, E., 1961. Zur plastischen Verformung des Vielkristalls. *Acta Metall. Mater*. 9(2), 155–191.

Kuroda, M., Tvergaard, V., 2000. Forming limit diagrams for anisotropic metal sheets with different yield criteria. *Int. J. Solids. Struct*. 37(37), 5037–5059.

Lebensohn, R.A., Tomé, C. N., 1993. A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals: application to zirconium alloys. *Acta Metall. Mater*. 41(9), 2611–2624.

Lebensohn, R.A., Liu, Y., Ponte Castañeda, P., 2004. On the accuracy of the self-consistent approximation for polycrystals: comparison with full-field numerical simulations. *Acta Mater*. 52(18), 5347–5361.

Lee, E. H., 1969. Elastic-plastic deformation at finite strains. *J. Appl. Mech*. 36, 1–6.

Lévesque, L., Inal, K., Neale, K.W., Mishra, R.K., 2010. Numerical modeling of formability of extruded magnesium alloy tubes. *Int. J. Plast*. 26, 65–83.

Lian, J., Barlat, F., Baudelet, B., 1989. Plastic behavior and stretchability of sheet metals. Part II: Effect of yield surface shape on sheet forming limit. *Int. J. Plast*. 5, 131–147.

Lin, T.H., 1957. Analysis of elastic and plastic strains of face-centered cubic crystals. *J. Mech. Phys. Solids* 5, 143–149.

Lin, T.H., 1971. Physical theory of plasticity. *Adv. Appl. Mech*. 11, 255–311.

Lipinski, P., Berveiller, M., 1989. Elastoplasticity of micro-inhomogeneous metals at large strains. *Int. J. Plast*. 5, 149–172.

Lipinski, P., 1993. Modélisation du comportement des métaux en transformations élasto-plastiques finies à partir des méthodes de transition d'échelles. *Habilitation à Diriger des Recherches, Université de Metz*.

Lipinski, P., Berveiller, M., Reubrez, E., Morreale, J., 1995. Transition theories of elastic-plastic deformation of metallic polycrystals. *Archive of Applied Mechanics* 65(5), 291–311.

Lorrain, J-P., 2005. Critère de ductilité basé sur la perte d'ellipticité du module tangent élastoplastique déduit d'un modèle autocohérent. *Thèse de doctorat, Arts et Métiers ParisTech*.

Loxan, A.N., Davis, N., Levenson, A., 1942. Table of the Zeros of the Legendre Polynominals of Order 1-16 and the Weight Coefficients for Gauss' Mechanical Quadrature Formula. *B. Am. Math. Soc*. 48, 739–743.

Mandel, J., 1965. Généralisation de la théorie de la plasticité de W.T. Koiter. *Int. J. Solids Struct*. 1, 273–295.

Manopulo, N., Hora, P., Peters, P., Gorji, M., Barlat, F., 2015. An extended Modified Maximum Force Criterion for the prediction of localized necking under non-proportional loading. *Int. J. Plast*. 75, 189–203.

Mansouri, L.Z., Chalal, H., Abed-Meraim, F., 2014. Ductility limit prediction using a GTN damage model coupled with localization bifurcation analysis. *Mech. Mater*. 76, 64–92.

Marciniak, Z., Kuczynski, K., 1967. Limit strains in processes of stretch-forming sheet metal. *Int. J. Mech. Sci*. 9(9), 609–620.

Miehe, C., 1996. Multisurface thermoplasticity for single crystals at large strains in terms of Eulerian vector updates. *Int. J. Solids. Struct*. 33, 3103–3130.

Miehe, C., Schröder, J., Schotte J., 1999. Computational homogenization analysis in finite plasticity simulation of texture development in polycrystalline materials. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng*. 134, 223–240.

Miehe, C., Schröder, J., 2001. A comparative study of stress update algorithms for rate-independent and rate-dependent crystal plasticity. *Int. J. Numer. Meth. Eng*. 50, 273–298.

Molinari, A., Canova, R.G., Ahzi, S., 1987. A self-consistent approach to large deformation polycrystal viscoplasticity. *Acta Metall*. 35, 2983–2994.

Molinari, A., Ahzi, S., Kouddane, R., 1997. On the self-consistent modeling of elastic-plastic behavior of polycrystals. *Mech. Mater*. 26, 43–62.

Neale, K.W., Chater, E., 1980. Limit strain predictions for strain-rate sensitive anisotropic sheets. *Int. J. Mech. Sci*. 22, 563–574.

Nebozyhn, M.V., Gilormini, P., Ponte Castañeda, P., 2001. Variational self-consistent estimates for cubic viscoplastic polycrystals: the effect of grain anisotropy and shape. *J. Mech. Phys. Solids* 49(2), 313–340.

Neil, C.J., Agnew, S.R., 2009. Crystal plasticity-based forming limit prediction for non-cubic metals: Application to Mg alloy AZ31B. *Int. J. Plast*. 25, 379–398.

Peeters, B., Seefeldt, M., Van Houtte, P., Aernoudt, E., 2001. Taylor ambiguity in BCC polycrystals: a non-problem if substructural anisotropy is considered. *Scripta Mater*. 45, 1349–1356.

Peeters, B., 2002. Multiscale modelling of the induced plastic anisotropy in IF steel during sheet metal forming. *PhD thesis, Katholieke Universiteit Leuven*.

Prager, W., 1949. Recent developments in the mathematical theory of plasticity. *J. Appl. Phys*. 20, 235–257.

Reubrez, E., Berveiller, M., Lipinski, P., 1992. Optimal crystallographic texture determination for metal forming processes using a self-consistent model. In: *13th. RISO Inter. Symp. on Materials Science*, 403–408.

Reuss, A., 1929. Berechmung der Fliessgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle. Z. Angew. *Math. Mech*. 9, 49.

Rice, J.R., 1971. Inelastic constitutive relations for solids: an internal variable theory and its application to metal plasticity. *J. Mech. Phys. Solids* 19, 433–455.

Rice, J.R., 1976. The localization of plastic deformation. In: *14th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics*, 207–220.

Rudnicki, J.W., Rice, J.R. 1975. Conditions for the localization of deformation in pressure-sensitive dilatant materials. *J. Mech. Phys. Solids* 23, 371–394.

Sachs, A., 1928. Zur Ableitung einer Fliessbedingung. *Z. der V.D.I*, 72,739.

Sawischlewski, E., Steinmann, P., Stein, E., 1996. Modelling and computation of instability phenomena in multisurface elasto-plasticity. *Comp. Mech*. 18, 245–258.

Scacciatella, E., 1993. Intégration d'un modèle de comportement élastoplastique à transition d'échelle dans un code de calcul de structures par éléments finis. *Thèse de doctorat, ENIM - Université de Metz*.

Schmid, E., 1924. Neure Untersuchungen an Metalkristallen. *Proc. Int. Cong. App. Mech. Delft*, 256–342.

Schmid, E., Boas, W., 1935. Plasticity of crystals. *Chapman and Hall*, London.

Schmidt-Baldassari, M., 2003. Numerical concepts for rate-independent single crystal plasticity. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng*. 192, 1261–1280.

Schwindt, C., Schlosser, F., Bertinetti, M.A., Signorelli, J.W., 2015. Experimental and Visco-Plastic Self-consistent evaluation of forming limit diagrams for anisotropic sheet metals: An efficient and robust implementation of the M-K model. *Int. J. Plast*. 73, 62–99.

Serenelli, M.J., Bertinetti, M.A., Signorelli, J.W., 2010. Investigation of the dislocation slip assumption on formability of BCC sheet metals. *Int. J. Mech. Sci*. 52 (12), 1723–1734.

Serenelli, M. J., Bertinetti, M. A., Signorelli, J.W., 2011. Study of limit strains for FCC and BCC sheet metal using polycrystal plasticity. *Int. J. Solids. Struct*. 48(7), 1109–1119.

Shalaby A., Havner, K.S., 1978. A general kinematical analysis of double slips. *J. Mech. Phys. Solids*. 26, 79–92.

Signorelli, J.W., Bertinetti, M.A., Turner, P.A., 2009. Predictions of forming limit diagrams using a rate-dependent polycrystal self-consistent plasticity model. *Int. J. Plast*. 25, 1–25.

Signorelli, J.W., Serenelli, M.J., Bertinetti, M.A., 2012. Experimental and numerical study of the role of crystallographic texture on the formability of an electro-galvanized steel sheet. *J. Mater. Process. Technol*. 212, 1367–1376.

Steinmann, P., Kuhl, E., Stein, E., 1998. Aspects of non-associated single crystal plasticity: influence of non-Schmid effects and localization analysis. *Int. J. Solids Struct.* 35, 4437–4456.

Stören, S., Rice, J.R., 1975. Localized necking in thin sheets. *J. Mech. Phys. Solids* 23 (6), 421–441.

Tabourot, L., 1992. Loi de comportement élastoviscoplastique du monocristal en grandes déformations. *Thèse de doctorat, Université de Grenoble*.

Tadano, Y., Kuroda, M., Noguchi, H., Shizawa, K., 2007. A polycrystalline analysis of hexagonal metal based on the homogenized method. *Key Eng. Mat.* 340, 1049–1054.

Tadano, Y., Yoshida, K., Kuroda, M., 2013. Plastic flow localization analysis of heterogeneous materials using homogenization-based finite element method. *Int. J. Mech. Sci*. 72, 63–74.

Takahashi, H., 1998. Predictions of plastic stress-strain relations of polycrystals based on the Lin model. *Int. J. Plast*. 4(3), 231–250.

Taylor, G.I., Elam, C.F., 1923. The distortion of an aluminum crystal during a tensile test. *Proc. Royal Soc. London* A 102, 643–667.

Taylor, G.I., 1938. Analysis of plastic strain in a cubic crystal. *J. Inst. Met*. 62, 307–324.

Terada, K., Watanabe, I., 2007. Computational aspects of the tangent moduli tensors in rate-independent crystal elastoplasticity. *Comp. Mech*. 40, 497–711.

Toth, L.S., Dudzinski, D., Molinari, A., 1996. Forming limit predictions with the perturbation method using stress potential functions of polycrystal viscoplasticity. *Int. J. Mech. Sci.* 38, 805–824.

Truesdell, C., 1974. Introduction à la mécanique rationnelle des milieux continus. *Masson et Cie, Paris*.

Voigt, W., 1889. Uber die Beziehung zwischen den beiden Elastizitätskonstanten isotroper Körper. *Wied. Ann.* 38, 573.

Wu, P.D., Neale, K.W., Van der Giessen, E., 1997. On crystal plasticity FLD analysis. *Proc. Roy. Soc. Lond*. A 453, 1831–1848.

Wu, P.D., Neale, K.W., Van der Giessen, E., Jain, M., Makinde, A., MacEwen, S.R., 1998. Crystal plasticity forming limit diagram analysis of rolled aluminum sheets. *Metall. Mater. Trans*. A 29, 527–535.

Wu, P.D., MacEwen, S.R., Lloyd, D.J., Neale, K.W., 2004. Effect of cube texture on sheet metal formability. *Mater. Sci. Eng*. A 364, 182–187.

Xue, Z., Hutchinson, J.W., 2007. Neck retardation and enhanced energy absorption in metal–elastomer bilayers. *Mech. Mater*. 39(5), 473–487.

Xue, Z., Hutchinson, J.W., 2008. Neck development in metal/elastomer bilayers under dynamic stretchings. *Int. J. Solids. Struct*. 45(13), 3769–3778.

Yoshida, K., Ishizaka, T., Kuroda, M., Ikawa, S., 2007. The effects of texture on formability of aluminum alloy sheets. *Acta Mater*. 55(13), 4499–4506.

Yoshida, K., Brenner, R., Bacroix, B., Bouvier, S., 2009. Effect of regularization of Schmid law on self-consistent estimates for rate-independent plasticity of polycrystals. *Eur. J. Mech. A/Solids* 28, 905–915.

Yoshida, K., Kuroda, M., 2012. Comparison of bifurcation and imperfection analyses of localized necking in rate-independent polycrystalline sheets. *Int. J. Solids. Struct*. 49, 2073–2084.

Zaoui, A., 1970. Distribution continue de dislocations : théorie générale et quelques applications. *Thèse de doctorat, Université de Paris*.

Zhang, L., Wang, J., 2012. Modeling the localized necking in anisotropic sheet metals. *Int. J. Plast*. 39, 103–118.

Zhou, Y., Neale, K.W., 1995. Predictions of forming limit diagrams using a rate-sensitive crystal plasticity model. *Int. J. Mech. Sci.* 37, 1–20.

APPROCHE MULTI-ÉCHELLES POUR UNE PRÉDICTION FIABLE DE LA DUCTILITÉ DES MATÉRIAUX MÉTALLIQUES

RESUME : Cette thèse a pour objectif principal de développer un outil numérique capable de prédire la ductilité des matériaux polycristallins. Cet outil est basé sur le couplage de l'approche multi-échelles autocohérente à deux critères d'instabilités plastiques : la théorie de bifurcation et l'approche d'imperfection initiale. Le schéma autocohérent est utilisé pour déterminer le comportement d'un agrégat polycristallin (supposé représentatif du matériau étudié) à partir du comportement des monocristaux constitutifs. Le comportement à l'échelle monocristalline est formulé dans le cadre des grandes déformations élastoplastiques. Deux différentes versions du critère de Schmid sont successivement utilisées pour modéliser l'écoulement plastique monocristallin : la version classique et une version régularisée. Pour intégrer numériquement les équations constitutives à l'échelle monocristalline, deux algorithmes ont été développés : un algorithme de type évolutif et un algorithme de type retour radial. Les équations gouvernant le schéma autocohérent ont été revisitées. Pour résoudre ces équations, un nouvel algorithme numérique a été proposé, qui est montré être plus efficace que les algorithmes existants communément basés sur la méthode du point fixe. De plus, une approche numérique robuste a été développée, qui permet de coupler le modèle autocohérent à l'approche d'imperfection initiale. La performance ainsi que la robustesse des différents algorithmes et schémas numériques développés ont été mis en évidence à travers plusieurs résultats de simulation. L'effet de plusieurs paramètres et choix de modélisation sur la prédiction de formabilité des tôles métalliques a été extensivement analysé.

Mots clés : approche multi-échelles, plasticité cristalline, ductilité, instabilité plastique, théorie de bifurcation, approche d'imperfection initiale, courbe limite de formage.

A MULTISCALE APPROACH FOR A RELIABLE PREDICTION OF THE DUCTILITY OF METALLIC MATERIALS

ABSTRACT: The main objective of this PhD thesis is to develop a numerical tool capable of predicting the ductility of polycrystalline materials. This tool is based on the coupling of the self-consistent multiscale approach with two plastic instability criteria: the bifurcation theory and the initial imperfection approach. The self-consistent scheme is used to derive the mechanical behavior of a polycrystalline aggregate (assumed to be representative of the studied material) from that of its microscopic constituents (the single crystals). The constitutive framework at the single crystal scale follows a finite strain rate-independent formulation. Two different versions of the Schmid law are successively used to model the plastic flow: the classical version and a regularized one. To solve the constitutive equations at the single crystal scale, two numerical algorithms have been developed: one is based on the usual return-mapping scheme and the other on the so-called ultimate scheme. The equations governing the self-consistent approach have been revisited. To solve these equations, a new numerical scheme has been developed, which is shown to be more efficient than the existing schemes commonly based on the fixed point method. Also, a robust numerical approach has been developed to couple the self-consistent model to the initial imperfection approach. The performance and the robustness of the different numerical schemes and algorithms developed have been highlighted through several simulation results. The impact of various parameters and modeling choices on the formability prediction of sheet metals has been extensively analyzed.

Keywords: multiscale approach, crystal plasticity, ductility, plastic instability, bifurcation theory, initial imperfection approach, forming limit diagram.

ARTS ET MÉTIERS ParisTech

ParisTech
INSTITUT DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES
PARIS INSTITUTE OF TECHNOLOGY