Comportement mécanique du superalliage base nickel à solidification dirigée DS200+Hf

Florent Coudon

▶ **To cite this version:**

Florent Coudon. Comportement mécanique du superalliage base nickel à solidification dirigée DS200+Hf. Matériaux. Université Paris sciences et lettres, 2017. Français. NNT : 2017PSLEM062 . tel-01845122

HAL Id: tel-01845122
https://pastel.hal.science/tel-01845122

Submitted on 20 Jul 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.

THÈSE DE DOCTORAT

de l'Université de recherche Paris Sciences et Lettres
PSL Research University

Préparée à MINES ParisTech

Comportement mécanique du superalliage base nickel à solidification dirigée DS200+Hf

École doctorale n°432

SCIENCES ET MÉTIERS DE L'INGÉNIEUR

Spécialité SCIENCES ET GÉNIE DES MATÉRIAUX

COMPOSITION DU JURY :

Mr Stéphane BERBENNI
Université de Lorraine, Rapporteur

Mr Rodrigue DESMORAT
ENS Paris-Saclay, Rapporteur

Mme Florence PETTINARI-STURMEL
Université de Toulouse (III), Présidente

Mr Gunther EGGELER
Ruhr-Universität Bochum, Examinateur

Mr Kacem SAI
ENI de Sfax, Examinateur

Mr Jonathan CORMIER
ISAE-ENSMA, Examinateur

Mr Georges CAILLETAUD
MINES ParisTech, Examinateur

Mr Lionel MARCIN
Safran SA, Examinateur

Soutenue par **Florent COUDON**
le 27 mars 2017

Dirigée par **Georges CAILLETAUD**

MINES ParisTech | PSL RESEARCH UNIVERSITY PARIS

Remerciements

Les travaux de thèse qui ont conduit à l'écriture de ce manuscrit ont été réalisés au Centre des matériaux, PSL Research University, MINES ParisTech et ont été financés par SafranTech, Safran SA. Ils s'inscrivent dans un projet plus large à destination des deux motoristes du groupe Safran, Safran Aircraft Engines et Safran Helicopter Engines, pour mieux dimensionner les pièces en DS200+Hf.

Je tiens d'abord à remercier comme il se doit mon directeur de thèse, Georges Cailletaud, pour m'avoir initié aux joies de la mécanique des matériaux. Nous avons pu avoir de nombreuses discussions, toujours passionnantes, sur les secrets de la plasticité cristalline, de la règle en beta et même sur l'avenir des modèles avec le big data ! Tu m'as aussi motivé pour faire l'ascension du volcan Mona Kea avec ma Nissan Versa Note de location, et cela en valait largement le coup !

Un grand merci à Jonathan Cormier, qui a encadré cette thèse depuis Poitiers. Ton regard sur ces travaux a permis de raccrocher, tant bien que mal, les approches numériques développées aux mécanismes observés. Tu m'as expliqué de nombreux phénomènes existants dans ces matériaux très compliqués que tu connais par cœur. Promis, je ferai attention avant de dire « système de glissement cubique ».

Et puis il y a eu des essais. Bon je ne me risquerai pas à dire qu'il y a eu une "partie expérimentale" puisque les essais réalisés se comptent sur les doigts d'une main. Je tiens à remercier Alain Köster pour avoir encadré cette thèse et m'avoir aidé à réaliser ces fameux essais biaxiaux. Et du coup j'ai encore envie de faire des essais. D'ailleurs, nous continuons avec les autres éprouvettes en 2017 hein ! ?

Du côté industriel, ces travaux ont été suivis par Lionel Marcin de SafranTech. Je te remercie pour m'avoir fait confiance et laissé explorer des voies obscures, très théoriques et sans réel but industriel à court ou moyen terme. Tu as été très présent et tu m'as éclairci sur ce que je voulais faire après. Et donc merci de continuer à me faire confiance depuis que j'ai rejoint ton équipe MécaMat.

Je remercie également tous les membres de mon jury de thèse. Merci à Messieurs Stéphane Berbenni et Rodrigue Desmorat pour m'avoir fait l'honneur d'être rapporteurs de ce travail. Nos discussions m'ont permis de voir d'autres pistes d'études sur ce sujet passionnant. Je tiens à remercier Florence Pettinari-Sturmel pour avoir présidé ce jury. Je remercie également Gunther Eggeler et Kacem Saï de s'être déplacés pour examiner mon travail. Enfin, merci à Anaïs Gaubert pour avoir suivi une partie de ce travail, m'avoir bien épaulé avec WorkBench à Villaroche et d'avoir participé à ma soutenance.

Les résultats présentés s'appuient sur une forte collaboration avec une autre thèse menée par Lorena Mataveli Suave sur la durée de vie de l'alliage DS200+Hf. Je la remercie pour tous nos partages et discussions au sujet de notre matériau exotique. Je remercie également toutes les personnes qui ont assisté aux réunions d'avancement du projet DS200 : Zéline Hervier, Anthony Burteau, Arnaud Longuet, Fabien Corpace, Stéphane Gourdin, Arjen Roos, Tonya Rose, Hyung-Jun Chang, Lucie Lanciaux, Damien Ponsen, Denis Bertheau,... Un merci particulier à Patrick Villechaise pour le temps que tu m'as accordé durant les essais MEB in situ et les discussions que cela a suscité. Finalement, cette étude a bénéficié d'un excellent cadre de travail,

avec un groupe d'où de nombreuses idées ont émergé. Encore merci à tous.

Je remercie tout le personnel du CDM avec qui j'ai pu interagir. Un merci particulier à l'équipe VAL (Djamel, Kaïs, Nikolay, Farida et Stéphane). Vous m'avez souvent débloqué face aux nombreux « Segmentation Fault » de Zebulon ... Un merci également à l'équipe COCAS (SIMS depuis peu) avec qui j'ai eu le plaisir de discuter autour d'un Nespresso Grand Cru. Et puis merci aux collègues thésards avec qui j'ai passé trois excellentes années (et un peu plus). Merci à Hiba qui m'a supporté en tant que colloc' de bureau. Courage pour la dernière ligne droite. Et à mes amis du noyau dur (Fabien, Vincent, PAP et Hélène), un grand merci pour la motivation et le réconfort moral au quotidien. J'espère qu'on continuera les soirées sur Paris encore longtemps.

A mes amis parisiens, je vous remercie pour m'avoir fait oublier le temps d'une soirée ou d'un week-end, la règle en beta et les agrégats DS. Vous m'avez souvent demandé ce que je faisais et vous avez réussi à tenir cinq minutes voire 3h pour ceux qui m'ont soutenu le 27 mars. Du fond du cœur merci. Et mon Brice, qui aurait cru qu'un jour je serai docteur ! Merci d'être là malgré les kilomètres.

Enfin, si j'en suis à écrire les remerciements de ma thèse, c'est sans nul doute parce que j'ai toute ma famille derrière moi pour me soutenir. Merci particulièrement à mes parents qui m'ont toujours permis de réaliser mes projets, même les plus fous. Vous m'avez tellement donné. Merci.

Les derniers mots sont pour Karine, ma femme chérie, qui me soutient depuis toutes ces années. Tu m'as accompagné dans cette aventure et l'a rendue bien plus belle. Je peux sereinement me lancer dans de nouveaux défis te sachant à mes côtés.

TABLE DES MATIÈRES

Page

1 Recherche d'un comportement local du DS200 **7**
1.1 Caractéristiques de l'alliage étudié . . . 7
1.1.1 Observations multi-échelles du matériau . . . 7
1.1.2 Répartition des éléments chimiques au sein de la microstructure . . . 10
1.1.3 Systèmes de glissement et modes de durcissement . . . 12
1.1.4 Prépondérance des types de durcissement en fonction de la température 14
1.2 Modèle décrivant le comportement mécanique du monocristal . . . 15
1.2.1 Définition de la limite d'élasticité et comportement en plasticité parfaite 16
1.2.2 Variables d'écrouissage . . . 23
1.3 Identification des paramètres pour le MarM200 + Hf . . . 28
1.3.1 Paramètres matériau du MarM200+Hf à 650 °C . . . 29
1.3.2 Paramètres matériau traduisant le comportement d'un monograin de DS200 à 900 °C . . . 34

2 Les niveaux de description d'un agrégat polycristallin **39**
2.1 Simulation d'agrégats en champ complet : construction d'un comportement mécanique de référence . . . 40
2.1.1 Obtention des propriétés effectives du polycristal . . . 42
2.1.2 Définition d'une quantité représentative « par phase » . . . 46
2.1.3 Quantification de la fluctuation intra-granulaire . . . 50
2.2 Une modélisation simplifiée du problème polycristallin : l'approche macroscopique . . . 52
2.2.1 Structure générale d'un modèle mécanique macroscopique . . . 53
2.2.2 Introduction de l'anisotropie du matériau DS . . . 55
2.3 Un niveau intermédiaire dans la représentation d'un agrégat cristallin : l'approche en champ moyen . . . 57
2.3.1 Point de départ de l'homogénéisation en élasticité linéaire . . . 58
2.3.2 Extensions courantes du schéma auto-cohérent à la plasticité . . . 70
2.3.3 Un traitement plus rigoureux de la viscoplasticité . . . 75
2.3.4 D'autres voies pour la micromécanique . . . 77

3 Construction d'un modèle pour le superalliage DS200 **83**
3.1 Développement d'une règle en β en élasticité hétérogène . . . 84
3.1.1 De la formulation incrémentale de Hill à une règle en β « hétérogène » 84
3.1.2 Premiers résultats . . . 90
3.2 Analyse des réponses mécaniques en champ moyen et en champ complet pour un alliage DS . . . 96

3.2.1 Chargements transverses monotones . . . 97
3.2.2 Chargements cycliques uniaxiaux ou biaxiaux . . . 106
3.3 De l'agrégat numérique au matériau réel . . . 112
3.3.1 Modélisation mécanique du DS200 sous une sollicitation transverse . . . 113
3.3.2 Impact de la tortuosité des joints de grains sur le champ mécanique . . . 114
3.3.3 Introduction d'une désorientation primaire : cristallographique et géométrique . . . 121

4 Essais biaxiaux et simulations numériques pour le DS200 127
4.1 Matériel et méthode . . . 127
4.1.1 Caractéristiques de l'éprouvette . . . 128
4.1.2 Instrumentation de l'essai . . . 131
4.1.3 Trajet de chargement étudié . . . 132
4.1.4 Conditions aux limites de la modélisation associée . . . 133
4.2 Résultats expérimentaux . . . 138
4.2.1 Analyse des données globales . . . 138
4.2.2 Mesure des champs locaux de déformation . . . 139

5 Vers l'analyse des réponses mécaniques de structures oligogranulaires 153
5.1 Modélisation d'une structure tridimensionnelle en champ complet . . . 154
5.1.1 Mise en données . . . 154
5.1.2 Variabilité de la réponse mécanique : cas d'une traction biaxiale . . . 157
5.2 Utilisation des variables locales d'un modèle en champ moyen . . . 166
5.2.1 Localisation du modèle à champs moyens . . . 167
5.2.2 Equilibrage des valeurs moyennes par phase cristallographique . . . 170

Conclusion et perspectives 189

Bibliographie 197

Annexes 211
1 Notations couramment utilisées dans ce manuscrit . . . 211
2 Loi de comportement locale à différentes températures . . . 213
3 Bornes de Reuss et Voigt dans le cas d'un agrégat DS . . . 219
4 D'autres transitions d'échelles en élastoviscoplasticité . . . 223
5 Plan de l'éprouvette cruciforme utilisée pour les essais biaxiaux . . . 227

OBJET DE L'ÉTUDE

En juillet 2016, le programme informatique *AlphaGo* devient le meilleur joueur mondial du jeu de Go. Sur ce jeu, la taille du plateau et les possibilités de déplacement sont nettement plus riches que pour les échecs, rendant le calcul de toutes les possibilités par force brute irréaliste (l'arbre de recherche a une taille d'environ 250^{150}). Pourtant, par le biais de nouvelles techniques sur la prise de décision et des méthodes d'apprentissage maîtrisées (machine learning), un des premiers verrous vers l'intelligence artificielle vient d'être levé [Silver et al., 2016]. C'est là un des enjeux majeurs du numérique : utiliser de manière efficace la puissance croissante des calculateurs pour assister la prise de décision face à des problèmes où une partie des variables entrantes est aléatoire donc indéterminée. Dans le jeu de Go, ce sont les décisions de l'adversaire qui font que chaque partie est différente et que le suspens sur la victoire perdure.

La mécanique et le numérique

En mécanique des matériaux, chaque problème possède également ses variables « indéterminées » et qui durant longtemps ont été éliminées par des lissages et/ou des moyennes « en montant aux échelles supérieures ». Par exemple pour un matériau métallique cristallin, la répartition spatiale, la morphologie et l'orientation cristallographique des grains qui constituent un morceau de matière prélevé au hasard dans une structure sont des variables indéterminées (car fluctuantes). De même que les parties du jeu de Go, chaque volume de matière est différent à partir d'un certain niveau de description. Encore de nos jours, l'étude du comportement mécanique d'une structure métallique se réalise souvent dans le cadre général de la mécanique des milieux continus, l'hypothèse sous-jacente étant qu'un grand nombre de grains sont contenus dans un volume infinitésimal de la structure. La loi de comportement donne alors une valeur globale dans ce volume de l'état de contrainte et de déformation du matériau. En réalité, le modèle donne une moyenne (sous réserve qu'il soit juste) autour d'une répartition plus ou moins dispersée dépendant du niveau d'hétérogénéité du matériau. De même sur ce problème, le calcul direct qui consiste à étudier en chaque point de la structure toutes les combinaisons cristallographiques possibles afin d'évaluer la distribution des contraintes/déformations à cette échelle n'est pas réaliste. Un des espoirs est de voir se développer de nouvelles techniques couplant la mécanique au numérique et donnant accès à des informations plus riches sur l'état du matériau voire permettent de concevoir de nouveaux matériaux optimisés pour l'application. Cette idée s'intègre dans le concept plus général de l'*integrated computational materials engineering* (ICME) [Allison, 2011, McDowell et al., 2010, Panchal et al., 2013] cherchant à analyser les performances d'une structure à partir d'outils numériques contenant les données du procédé d'élaboration, les mécanismes physiques (aux différentes échelles) et leur répercussion sur les propriétés du matériau pour en tirer des solutions d'optimisation ou d'innovation. En particulier, l'un des objectifs est de lever les barrières empêchant de coupler les phénomènes physiques observés aux différentes échelles du matériau. De nos jours, des lois ont été identifiées à plusieurs niveaux de description (atomique, dislocations, grains, structures, ...) mais la

communication inter-échelle reste limitée. Enfin, un autre challenge est de développer des approches top-down (descendantes) partant d'objectifs sur les propriétés mécaniques/physiques et fournissant en résultat une microstructure idéale [McDowell et al., 2011]. Il s'agit alors de concevoir le matériau optimisé pour une application donnée.

Des leviers économiques pour l'industrie

Pour le bureau d'étude, dont l'objectif est de concevoir une pièce répondant à un cahier des charges en termes de performances, durabilité, coûts,..., la simulation numérique est devenue un outil essentiel. Les géométries, autrefois simplifiées pour obtenir des solutions analytiques (poutres ou plaques), peuvent maintenant être modélisées en tenant compte de leur morphologie complexe (profil d'aube, structures multi-perforées, ...) avec l'amélioration des techniques numériques (puissance des calculateurs, résolution des problèmes non linéaires, ...). Pour l'étude du comportement mécanique des aubes de turbines aéronautiques, les conditions aux limites imposées sur le calcul sont le résultat de calculs thermiques représentant le fonctionnement complet du moteur et de modélisations évaluant l'aérodynamisme de la pièce, optimisé pour entraîner de manière efficace l'arbre moteur mais générant des pressions à considérer. Une fois l'environnement extérieur défini, les ingénieurs testent l'aube numériquement sous des chargements représentatifs d'une mission moteur réaliste. Le matériau, considéré comme homogène, est représenté par une loi de comportement dans laquelle les paramètres ont été préalablement identifiés sur la réponse globale au moyen d'essais expérimentaux de plus en plus complexes. Ce modèle mécanique permet d'évaluer l'état de contrainte et de déformation du matériau pour chaque élément du maillage. La contrainte calculée est alors comparée à une valeur critique, donnée par l'expérience et sur laquelle on ajoute des marges, issues de l'imprécision des essais expérimentaux utilisés pour construire le modèle, d'erreurs sur les conditions aux limites par rapport à la réalité ou du manque d'information en sortie du modèle. Ces valeurs supplémentaires peuvent conduire à des sur-dimensionnements. Outre l'aspect numérique, des défauts de fabrication apparaissent au sein de la structure, générés en partie par le procédé et dont il faut évaluer la criticité. Des objectifs de qualité sont introduits, assurant qu'aucun défaut critique n'existe dans les pièces installées sur le moteur. Toutefois, même si le nombre d'essais réalisés sur des pièces est important, il ne représente qu'un très faible sous-ensemble des pièces produites. Il y a fort à parier que les configurations critiques n'ont jamais été testées, voire qu'elles restent inconnues. La simulation numérique pourrait aider, sous réserve que les modèles introduisent les mécanismes de déformation du matériau à une échelle pertinente, dans la recherche de ces évènements nocifs. Numériquement, il est possible de créer des plans d'expériences optimisés, d'amplifier les défauts et/ou les positionner où on souhaite afin d'affiner ces critères qualité. Encore faut-il avoir les essais expérimentaux, les modèles mécaniques et les outils numériques pour descendre aux échelles inférieures.

Le superalliage base nickel à solidification dirigée DS200+Hf

Les recherches menées durant cette thèse s'intéressent à la modélisation du comportement mécanique du superalliage base nickel à solidification dirigée DS200+Hf. Ce matériau est utilisé depuis une quarantaine d'années par Safran Aircraft Engines (anciennement Snecma) dans les parties chaudes des moteurs militaires d'abord *M53-P2* (Mirage 2000) puis *M88-2* (Rafale). Il est introduit pour la première fois sur une application civile dans le moteur *Olympus 593* développé pour le Concorde. Puis il est utilisé pour les aubes des étages dits « basse pression » de la

turbine du moteur *CFM56*. Sur le *Leap*, les aubes de turbines en DS200+Hf sont utilisées à tous les étages basse pression de la turbine (sauf le dernier en TiAl), et il sera également introduit sur le moteur *Silvercrest*. Par conséquent, un nombre exponentiel de pièces en DS2000+Hf va être produit au cours des prochaines années. Une connaissance poussée de cet alliage, en particulier des propriétés mécaniques et physiques, semble donc cruciale. Les pièces sont coulées dans un moule en céramique ; un gradient thermique et une vitesse de tirage du moule hors du four permettent d'imposer une solidification dirigée selon l'axe de l'aube qui correspond à la direction de la force centrifuge qui s'exerce lorsque le moteur est en fonctionnement. Ce procédé limite l'apparition de joints de grains orthogonaux à la direction d'effort principal (centrifuge), qui sont fragilisants en fatigue et fluage. Par conséquent, la morphologie résultante des grains dans le matériau est colonnaire. La structure cristalline des grains peut être qualifiée de cubique à faces centrées même si nous verrons dans la suite que la microstructure des superalliages est plus complexe. Dans le cas d'une microstructure « parfaite », une direction cristallographique de type $\langle 001 \rangle$ va être colinéaire à la direction de solidification pour tous les grains, l'énergie nécessaire à la croissance étant minimale. Dans la réalité, la direction de croissance est en général légèrement désorientée par rapport à l'axe ciblé. D'autre part, la direction $\langle 001 \rangle$ des grains est rarement alignée avec celle de solidification, formant un second angle de désorientation. Outre ces deux défauts, les grains, « cylindriques », ont une taille macroscopique pouvant atteindre 3 à $5\,\mathrm{mm}$ en fonction des conditions de fabrication et de la massivité des pièces. Finalement, de nombreux critères qualité sont formulés sur ce matériau à la texture cristallographique originale : désorientation maximale des grains, nombre minimum de grains dans la pale, positions critiques d'un joint de grains, morphologie de ces joints, ...

Les modélisations actuelles au bureau d'étude

Dans l'approche classique du bureau d'étude, la modélisation du comportement mécanique de cet alliage se base essentiellement sur des lois de comportement macroscopiques. Le matériau est supposé avoir suffisamment de grains dans un volume élémentaire pour que l'hétérogénéité cristallographique soit invisible à l'échelle de la pièce. On suppose que la séparabilité des échelles est assurée. Sous cette hypothèse, il est possible de construire une loi homogène tenant compte de l'orthotropie du matériau : la réponse mécanique sera différente dans la direction de solidification (longitudinale) et dans les directions transverses. C'est pourquoi un nombre de grains minimum est imposé dans la pale (moins d'une vingtaine), afin de minimiser la dispersion sur la réponse mécanique globale. Dans ce cas, un critère qualité est ajouté afin de rester dans le cadre de la modélisation, alors même que le fait de comporter un faible nombre de grains n'est probablement pas nocif, la pièce se rapprochant alors d'une aube monogranulaire, plus performante. Quand bien même une vingtaine de grains suffiraient à assurer une réponse globale stable, la jonction pale/pied (appelée rayon de raccordement) par exemple n'aura pas les mêmes performances mécaniques selon la répartition du/des grains présents. L'état de contrainte/déformation du matériau calculé par le modèle macroscopique et comparé à des valeurs limites validant la conception est éloigné du niveau réel des contraintes pouvant s'exercer. Dans les zones critiques de la pièce, la réponse mécanique dépend de la configuration cristallographique des deux ou trois grains présents. La modélisation mécanique doit donc inclure des niveaux plus locaux de description, permettant en particulier de tenir compte du caractère « oligocristallin » de la structure ($i.e.$ contenant un très faible nombre de grains). Partant de ce constat, la solution idéale serait alors de réaliser une série de calculs par force brute introduisant différentes microstructures au sein de la géométrie afin de tester un grand nombre de pièces virtuelles. L'approche de dimensionnement déterministe pourrait ainsi, laisser place

à des développements statistiques permettant de caractériser la probabilité d'atteindre un niveau de contrainte donné en chaque point géométrique de la pièce. Malheureusement, deux verrous persistent : premièrement, le nombre de combinaisons possibles est infini et, deuxièmement, le temps de calcul pour une simulation numérique est largement plus élevé que les modélisations macroscopiques actuelles.

Travaux de thèse

Dans le contexte exposé précédemment, nous avons montré que le matériau DS200+Hf nécessite un traitement particulier pour la modélisation. L'idée générale de la thèse consiste à construire un modèle tenant compte de certains phénomènes physiques qui agissent sur la réponse mécanique aux différentes échelles (glissement des dislocations, morphologie colonnaire, orientations cristallographiques), mais de manière simplifiée, afin qu'il soit utilisable sur des structures industrielles. Pour cela, nous commencerons par définir un comportement mécanique à l'échelle d'un grain de DS200+Hf. Ensuite, une montée d'échelle devra permettre de prédire la réponse mécanique d'un agrégat polycristallin à solidification dirigée. Le modèle, appelé alors « multi-échelle », sera également vérifié sur différents essais expérimentaux. En introduisant dans le modèle des variables représentant explicitement la morphologie et l'orientation des grains, il est alors possible d'étudier l'impact global de certains critères qualité, comme la désorientation des grains par rapport à la direction de solidification. Pour finir, nous aborderons le problème des structures en DS200+Hf, qui en raison du procédé d'élaboration et de la taille des pièces, sont constituées de quelques « gros grains » dont l'orientation cristallographique et la forme géométrique restent inconnues. Chaque pièce est différente des autres, et doit donc bénéficier d'un traitement spécifique. Nous évaluerons la dispersion de la réponse locale par rapport aux informations globales fournies par le modèle développé, expérimentalement sur des essais biaxiaux sur éprouvettes cruciformes à température ambiante, et numériquement par des simulations en champ complet sur des « pièces virtuelles ». Enfin, nous proposerons une technique de « calcul accéléré » permettant de reconstruire une dispersion simplifiée de la réponse locale du matériau avec peu de calculs. Ainsi, l'objectif final est de fournir deux voies de modélisation pour le DS200+Hf permettant : soit une analyse globale des performances de la structure (pré-dimensionnement), soit une analyse locale de la criticité de certains défauts microstructuraux en quelques points géométriques de la pièce.

Le manuscrit se décompose en cinq chapitres :

Chapitre 1 Ce chapitre traite de l'identification d'un modèle mécanique pour un monograin de DS200+Hf. Il aborde premièrement les mécanismes de déformation par glissement au sein d'un grain. Le cadre général de la plasticité cristalline est ensuite rappelé. Nous différencions plusieurs approches pour introduire l'écrouissage, phénoménologiques ou basées sur l'évolution de variables physiques observables (densités de dislocations). Enfin, le modèle mécanique choisi est recalé par rapport à des essais expérimentaux issus d'une thèse réalisée par **Mataveli Suave** [Mataveli Suave, 2017] à l'institut Pprime, en concertation avec notre propre étude.

Chapitre 2 Une fois le comportement local identifié dans l'approche micromécanique envisagée, cette partie traite des différentes méthodes existantes pour obtenir le comportement d'un agrégat polycristallin. Une première partie tente de définir une réponse mécanique de référence à partir de plusieurs modèles en champ complet pour différents agrégats synthétiques DS. Nous abordons ensuite succinctement des lois de comportement purement macroscopiques développées pour ces alliages. Enfin, une troisième partie détaille des différents

résultats importants de la littérature sur les approches en champ moyen basées sur le schéma auto-cohérent.

Chapitre 3 L'approche en champ moyen connue sous l'appellation de « règle en β » est retenue comme loi de transition entre l'échelle du grain et celle d'un élément de volume représentatif. Une première partie s'intéresse à l'extension de cette loi d'homogénéisation pour les alliages à solidification dirigée. Différents chargements sont alors étudiés (monotones et cycliques) en utilisant des modélisations en champ complet et différentes lois d'homogénéisation. Nous illustrerons alors l'efficacité du modèle développé. Enfin, une troisième partie confronte le modèle aux essais expérimentaux dans la direction transverse et évalue la possibilité de prise en compte de certains défauts de l'alliage réel : la tortuosité des joints et les désorientations géométrique et cristallographique.

Chapitre 4 Un essai biaxial monotone est conduit pour illustrer le pouvoir prédictif du modèle en β. Un axe de chargement correspond à la direction longitudinale de l'alliage tandis que le second axe sollicite le matériau en transverse. La corrélation d'images numériques est utilisée pour accéder aux champs de déplacement et de déformation dans la zone centrale de l'éprouvette cruciforme. Un « extensomètre virtuel » permet d'imposer directement les déplacements aux bords du maillage et de réaliser un calcul par éléments finis. Les résultats des simulations sont comparés aux réponses globales (forces/déplacements) expérimentales des deux axes de chargement. Ensuite, les champs de déformation issus de la corrélation d'images et de la simulation sont rapprochés qualitativement et quantitativement en examinant des positions spatiales particulières. Malgré une bonne tendance des simulations numériques, nous observons une localisation nette de la déformation sur certains grains, illustrant ainsi l'effet macroscopique du caractère oligogranulaire de l'éprouvette.

Chapitre 5 Ce dernier chapitre discute du problème des pièces oligocristallines. Puisque l'utilisation d'une loi homogène n'est pas pertinente compte tenu de la taille des grains, non négligeable devant les dimensions de la structure, la seule solution envisagée consiste à introduire explicitement ce niveau d'hétérogénéité dans le calcul, et à traiter ces structures par « force brute » : la réalisation d'un grand nombre de calculs sur des « pièces virtuelles » (géométrie + microstructure) permet alors d'obtenir en chaque point de la pièce, une densité de probabilité représentative de chaque variable physique. Une première partie propose une méthode d'insertion des grains dans une structure tridimensionnelle et la génération du maillage associé. Des premiers calculs sur une éprouvette cruciforme illustrent la fluctuation des champs mécaniques pour quatre réalisations. Une seconde partie aborde la possibilité d'estimer une part de ces dispersions à partir d'un calcul par éléments finis utilisant un modèle en champ moyen et une procédure « de localisation et d'équilibrage ».

CHAPITRE 1

Recherche d'un comportement local du DS200

Sommaire

1.1 Caractéristiques de l'alliage étudié 7
1.2 Modèle décrivant le comportement mécanique du monocristal 15
1.3 Identification des paramètres pour le MarM200 + Hf 28

Ce chapitre initie la démarche de la thèse. On débutera par des observations du matériau à différentes échelles pour déceler des contrastes de phases. Le parti pris de cette thèse est de vouloir insérer « les grains ». La texture cristallographique des alliages DS pilote l'anisotropie, en particulier à basse température. Ainsi l'approche micromécanique requiert-elle en premier lieu une échelle dite « locale ». Il s'agit de rendre compte des mécanismes physiques régissant la déformation au sein d'un monograin de DS200. Cela constituera notre première partie. Puis, il faut construire/choisir un modèle à cette échelle même si d'autres niveaux d'hétérogénéités pourraient être ajoutés : dendrites, γ/γ', ... Notre exposé considère des modèles « macroscopiques » à l'échelle du grain, qui permettent de maîtriser le temps de calcul sur une structure en introduisant la texture. Deux grandes voies sont alors possibles : des variables internes phénoménologiques, ou une approche construite à partir de considérations physiques. Après une description de deux modèles mécaniques, nous expliquerons les choix réalisés dans cette thèse, directement pilotés par les données expérimentales disponibles. A ce titre, il est important de mentionner que la modification du modèle mécanique afin de représenter plus fidèlement la réponse sous des chargements complexes ou anisothermes ne changerait pas la démarche multi-échelle entreprise. Dans un troisième temps, une identification des paramètres du modèle mécanique est proposée pour deux températures cibles, $650\,°C$ et $900\,°C$, définies par Safran.

1.1 Caractéristiques de l'alliage étudié

Les superalliages constituent une classe de matériaux métalliques ayant plus de dix éléments chimiques ajoutés à l'élément de base, le nickel dans notre cas. La composition chimique de l'alliage est optimisée afin d'améliorer une ou plusieurs caractéristiques mécaniques et/ou physiques. Pour le DS200, le tableau 1.1 recense les différents constituants chimiques avec les pourcentages minimum et maximum en fraction massique pour chacun d'eux.

1.1.1 Observations multi-échelles du matériau

La figure 1.1 montre différentes échelles d'observation de l'alliage étudié.

Regarder les différentes échelles caractéristiques du matériau permet d'illustrer la complexité

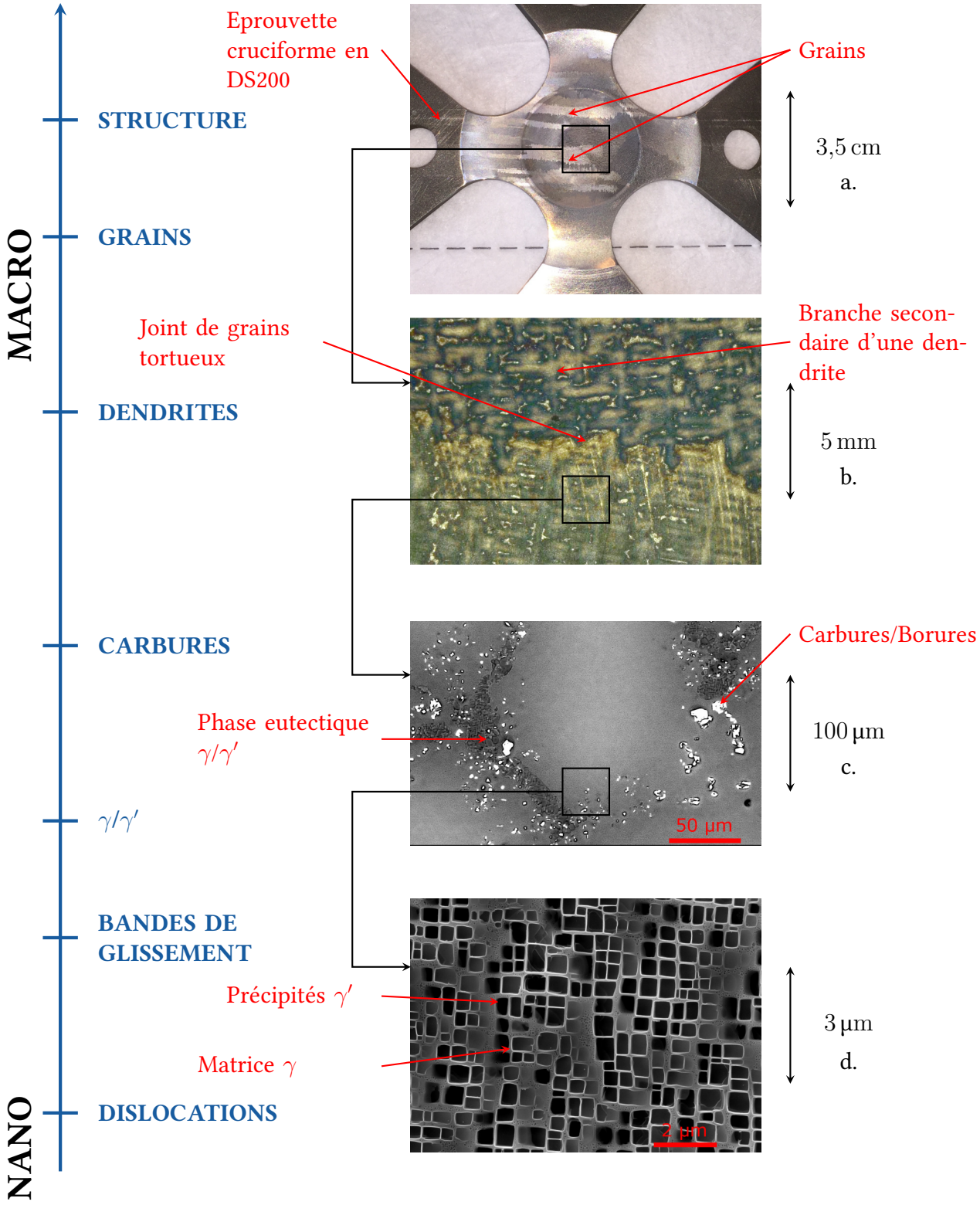


Figure 1.1 – *Différentes échelles d'observation du matériau DS200 : d'une structure en croix à des visualisations sous un microscope électronique à balayage (MEB). a. Eprouvette cruciforme, b. Mise en évidence des dendrites, c. Carbures et phase eutectique [Mataveli Suave, 2017], d. Microstructure γ/γ' [Mataveli Suave, 2017].*

	C	Cr	Ti	Al	Co	W	Nb	Zr	B
Comp min	0.08	8.00	1.75	4.75	9.00	11.5	0.75	-	0.01
Comp max	0.14	10.00	2.25	5.25	11.00	13.50	1.25	0.20	0.02
	Hf	Si	Mn	Fe	P	S	Cu	Pb	Bi
Comp min	1.75	-	-	-	-	-	-	-	-
Comp max	2.50	0.20	0.20	0.35	0.015	0.015	0.10	10 ppm	0.5 ppm

Table 1.1 – *Composition chimique massique nominale du matériau DS200 + Hf utilisé par Snecma (% massique)*

de celui-ci. L'approche directe consistant à modéliser le matériau à toutes les échelles à l'aide de « ponts » partant des mécanismes élémentaires au niveau des atomes jusqu'à la réponse macroscopique d'une structure est, à l'heure actuelle, encore inaccessible. Il faut donc faire des choix dans les phénomènes prépondérants pour construire uniquement les montées d'échelles nécessaires. Cela passe par une étude approfondie de/des échelles contrôlant la relation contrainte/déformation : quels phénomènes rendent singulière la déformation et conduisent à une anisotropie macroscopique ? En introduisant directement ces mécanismes locaux, on peut espérer construire une modélisation physique qui soit prédictive aux échelles supérieures.

Texture cristallographique

Une attaque chimique (à l'eau régale) sur une structure préalablement polie permet d'observer les grains à l'œil nu. Comme le montre la première image de la figure 1.1, leur taille n'est pas négligeable, comparée aux zones sollicitées de l'éprouvette, et par extension dans une pale d'aube de turbine aéronautique. En réalité, les grains germent avec une taille de l'ordre de 100 à $200\,\mu m$ en début de solidification. Dans [Mataveli Suave et al., 2016], les auteurs montrent une sélection des grains qui vont croître. Il s'agit de ceux qui présentent une faible désorientation primaire ($i.e.$ l'angle entre une direction <001> et l'axe macroscopique de solidification) ; les autres sont alors rapidement éliminés. Les auteurs montrent une densité de probabilité sur la désorientation primaire centrée sur une valeur de $0°$ et d'écart-type plus faible en fin de solidification. Une des conséquences de cette compétition lors de la croissance dirigée est une dentelure forte des joints pour ces « gros grains ». D'une part, le procédé de coulée doit être conçu afin de sélectionner la zone de la pièce ayant des « petits grains ». Par exemple, faut-il choisir de couler la pièce en débutant la solidification par le pied ou par le talon pour une aube ? D'autre part, il sera nécessaire de vérifier l'impact d'une telle tortuosité sur le comportement mécanique. Elle semble bénéfique sur les résultats expérimentaux en fluage (e.g. sur l'Inconel 718 dans [Yeh et al., 2011]) où elles conduisent à de plus forts allongements et des temps à rupture plus longs avec des joints tortueux. Les mêmes remarques ont été faites sur du Waspaloy pour des températures allant de $700\,°C$ à $800\,°C$ et une charge appliquée de 250 à $690\,MPa$ [Wisniewski and Beddoes, 2009]. Dans [Thibault et al., 2013], les auteurs donnent plusieurs explications sur ces bénéfices en fluage (haute température et faible contrainte), dont une chance plus faible de créer un chemin entre des cavités proches ralentissant de fait la propagation des fissures.

Echelle dendritique

La distance entre deux bras secondaires de dendrites est de 100 à 150 µm sur la figure 1.1.b. Certains constituants chimiques ségrègent dans l'une des deux parties du matériau : les dendrites ou les espaces inter-dendritiques. Par exemple, les éléments Ti ou Al vont se trouver en plus forte concentration dans ces espaces inter-dendritiques [Texier et al., 2014]. Des traitements thermiques permettent de réduire la ségrégation, mais l'homogénéité est rarement atteinte. Cela explique en partie par une teneur plus importante en précipités γ', de plus grande taille et de forme grossière dans les espaces inter-dendritiques [Arnoux, 2009]. Un contraste de comportement mécanique est observé à cette échelle sur le superalliage MCNG à température ambiante (mesures de nanodureté) [Milhet et al., 2012]. Un autre effet concerne les coefficients de dilatation différents pour ces deux zones, engendrant des contraintes additionnelles à chaud. Le vieillissement microstructural à très haute température n'évolue pas de la même manière dans ces deux zones [Epishin et al., 2004].

Carbures, structurants et/ou fragilisants ?

Au microscope électronique à balayage (MEB), la troisième image de la figure 1.1 montre de nombreux carbures (image issue de [Mataveli Suave, 2017]). Ceux-ci forment souvent des clusters avec une taille d'une dizaine de micromètres par particule. Dans les espaces inter-dendritiques, leur taille peut atteindre la centaine de micromètres. Cette dimension élevée est un facteur limitant pour le temps à rupture en fatigue [Mataveli Suave, 2017]. Ils se manifestent aussi « en ligne » sur le joint de grains, ce qui favorise une rupture inter-granulaire [Mataveli Suave, 2017]. Toutefois, des études ont montré que les carbures d'hafnium dans les joints permettent le renforcement de ceux-ci en fluage, en augmentant sensiblement la ductilité à chaud en sens travers [Duhl and Sullivan, 1971, Berthod and Conrath, 2016]. Cependant les carbures vont s'oxyder préférentiellement lorsqu'ils sont situés à proximité de la surface. Ces observations confirment qu'il y a un compromis à trouver entre renforcement des joints de grains et rupture prématurée.

Composite γ/γ'

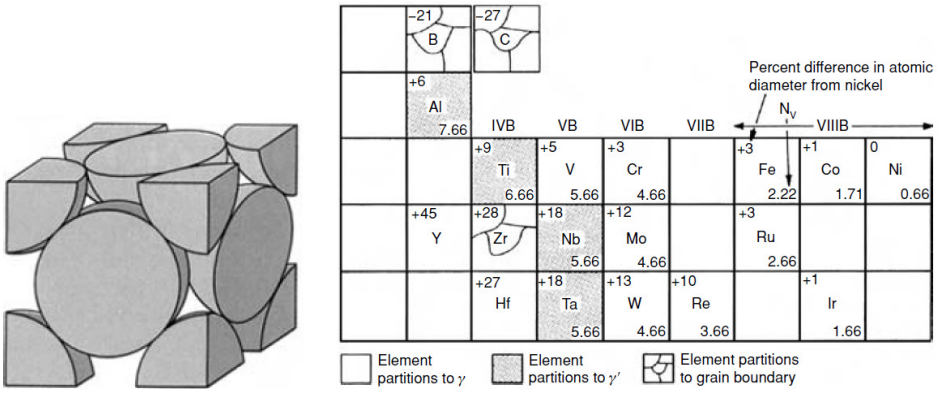
L'échelle largement commentée dans la littérature concerne l'aspect biphasé γ/γ' à l'échelle micrométrique et son évolution à haute température (voir par exemple le chapitre de **Pollock** et **Field** [Pollock and Field, 2002]). Et pour cause, les propriétés mécaniques remarquables de cette gamme d'alliage proviennent essentiellement de cette échelle du matériau. Cette microstructure est stable jusqu'à une température proche de 800 °C dans de nombreux alliages monogranulaires. Les deux prochaines parties sont consacrées à l'étude du matériau à ce dernier niveau. Premièrement, les deux phases seront définies en termes de composition chimique, configurations cristallographiques, et puis les différents modes de durcissement induits par l'hétérogénéité du matériau seront discutés. Enfin, les phénomènes prépondérants aux températures et modes de sollicitation qui sont étudiés dans cette thèse seront détaillés.

1.1.2 Répartition des éléments chimiques au sein de la microstructure

A l'état pur, le Nickel va prendre une structure cristallographique dite cubique à faces centrées (CFC) (voir le schéma 1.2.a) pour des températures allant de l'ambiante à 1455 °C, tempéra-

ture de fusion du matériau. L'aspect biphasé du matériau à l'échelle microscopique est lié à la présence d'une phase durcissante apparue par précipitation et appelée communément γ' en référence à la matrice de Ni austénitique appelée γ. Ces précipités γ' ont une structure cristallographique ordonnée dite $L1_2$ qui se rapproche de la maille CFC, à la différence près que d'autres éléments chimiques remplacent le Ni sur les sommets du cube. La composition de cette phase est alors Ni_3X où X est appelé un élément γ'-gène. En première approche, la plupart des éléments chimiques vont se trouver en solution solide dans une des deux phases, γ ou γ'. Une façon de connaître l'emplacement de chacun consiste à analyser les distances inter-atomiques des atomes comme le propose **Reed** dans [Reed, 2006] (voir le tableau périodique en 1.2.b).

De manière simple, si l'atome en question a une distance inter-atomique proche de celle du Ni, il va se substituer aux atomes de Ni dans la matrice austénitique CFC. C'est notamment le cas pour le cobalt (Co) et le chrome (Cr). Si l'atome est relativement petit, il pourra s'insérer dans la maille CFC dans les sites interstitiels (tétraédriques ou octaédriques). Quel que soit le cas de figure, cette substitution/addition génère une singularité, qui se traduit par un champ mécanique en traction/compression.
Pour les éléments bien plus « gros » que le Ni comme l'aluminium (Al) ou le titane (Ti), on va avoir une précipitation dans la structure $L1_2$ décrite précédemment. La proportion en éléments γ'-gènes est déterminée avec rigueur afin d'obtenir un pourcentage volumique optimal en précipités (entre 60 et $75\,\%$ si on regarde le temps à rupture en fluage [Murakumo et al., 2004]). Pour les agrégats polycristallins faits avec ce type d'alliage, il est plus difficile d'assurer avec précision la teneur en précipités. Dans l'alliage DS200, cette proportion est plus faible et atteint généralement $60\,\%$ dans les dendrites.



a. b.

Figure 1.2 – *Schéma de la maille cristallographique élémentaire CFC (a.) et position des différents éléments d'alliage pour les superalliages à base Ni dans le tableau périodique (b.) [Reed, 2006].*

Une des propriétés remarquables des superalliages durcis par une seconde phase est que les précipités sont dits cohérents avec la matrice γ, ce qui signifie que les plans cristallographiques $\{001\}$ des deux phases ont des normales colinéaires. Toutefois, les deux empilements cristallins n'ont pas le même paramètre de maille a, ce qui génère une distorsion élastique progressive des maillons élémentaires à l'interface γ/γ'. Cette distorsion est quantifiable par le biais d'un

désaccord paramétrique, appelé aussi « *misfit* » et défini par la relation :

$$\delta = 2\frac{a_{\gamma'} - a_{\gamma}}{a_{\gamma'} + a_{\gamma}} \tag{1.1}$$

Ce paramètre n'est pas constant. Il peut être calculé par une moyenne volumique des différents éléments en solution dans la phase, affectée d'un coefficient dit « de Vegard ». Les effets du *misfit* sur les propriétés physiques du matériau ne sont pas tous bien connus. Par exemple, si on considère que les différentes étapes de précipitation de la phase γ' vont d'une forme sphérique vers un cube puis un réseau de cubes, la valeur du *misfit* pourrait influer les cinétiques de chaque étape. En pratique, si on cherche à avoir un réseau de cubes, il faudra soit jouer sur les composants chimiques pour avoir un *misfit* permettant cette morphologie des γ' ou bien adapter les temps de revenu thermique. D'autres études ont montré que le signe du *misfit* a un impact sur l'aspect durcissant de la phase γ' [Mughrabi, 2014]. Enfin, ce désaccord de maille influence le vieillissement microstructural à haute température qui sera illustré par la suite.

Au-delà de cette description d'une microstructure approximativement qualifiée de « biphasée », d'autres précipitations peuvent voir le jour dans ce type d'alliage. En particulier, des carbures et des borures se forment et limitent la tenue en fatigue du matériau. Dans le cas de la version monocristalline du DS200 étudiée, ils vont être en quantité non négligeable puisque de l'hafnium est ajouté (pour conserver la composition chimique du DS200) et qu'il va former des carbures de taille micrométrique. Enfin, des phases dites « TCP » (Topologically Compact Phases) apparaissent si certains éléments lourds sont présents en trop fortes quantités.

De nombreux éléments chimiques sont ajoutés dans un objectif de « design de la microstructure » pour des propriétés mécaniques optimales. Toutefois, les superalliages base nickel sont aussi développés pour les zones à très haute température des turbomachines aéronautiques. Ils doivent donc résister à l'oxydation et à la corrosion mais aussi à l'impact répété de particules provenant de l'environnement extérieur ou produites dans la chambre de combustion (particules fines, sable provenant de l'extérieur, ...). Le chrome et l'aluminium vont former des couches d'oxyde protectrices respectivement Cr_2O_3 et Al_2O_3 en surface. Ces atomes sont présents en excès dans les phases γ/γ' et vont servir de réservoir à oxyde en surface : celui-ci se reforme au cours du cycle de vie. Toutefois, il est maintenant habituel, pour les aubes monocristallines proches de la chambre de combustion, de rajouter une barrière thermique en céramique et des canaux de refroidissement internes. Cette combinaison permettra un abattement de la température entre la surface de la barrière thermique et la couche adhérente voisin de $150\,°\mathrm{C}$ en régime permanent. Pour des applications à plus basse température $i.e.$ les aubes de turbines des étages « basse pression » qui font l'objet de cette étude, la structure peut être utilisée sans revêtement ou avec une couche d'alumine pré-formée lors d'une étape d'aluminisation. Notre étude se concentre uniquement sur des structures non revêtues.

1.1.3 Systèmes de glissement et modes de durcissement

Parlons maintenant des modes de déformation, par glissement de dislocations. Celles-ci peuvent être représentées comme des défauts d'empilement linéaire ayant la capacité de se mouvoir de proche en proche (mécanisme conservatif) par rupture et recollement d'atomes dans un réseau cristallin. La direction dans laquelle le défaut va se déplacer est appelée « vecteur de Burgers », noté $\vec{b}$. On comprend facilement que plus la norme de ce vecteur sera grande et plus l'énergie nécessaire pour déplacer la dislocation d'une distance atomique sera élevée : le « saut » à réaliser sera alors plus grand. Il existe donc des directions favorables aux déplacements des dislocations dans des plans qualifiés de « denses » : la combinaison d'un tel plan

avec une direction permet de définir un système de glissement. Les systèmes de glissement sont directement reliés à l'empilement atomique du cristal $i.e.$ la structure de la maille cristallographique élémentaire. Pour la structure cristallographique CFC, les systèmes de glissement majoritairement actifs, ou reconnus dans la littérature comme régissant la déformation inélastique dans de nombreux cas, sont les plans octaédriques (Fig. 1.3).

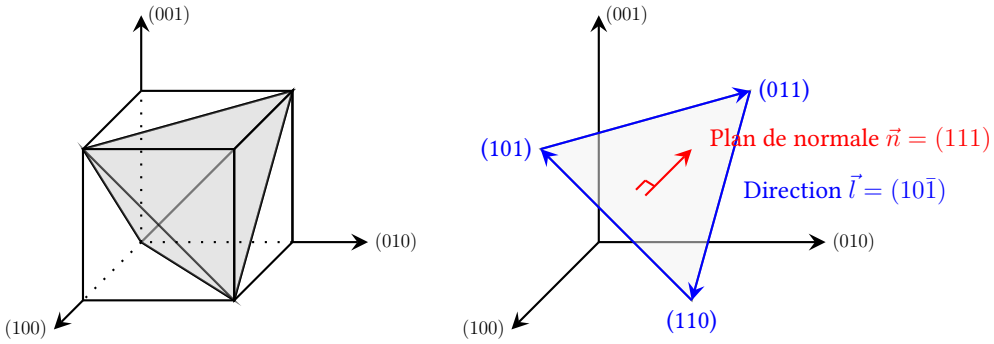


Figure 1.3 – *Illustration des 4 plans octaédriques de la maille élémentaire CFC (a.) et définition de la normale au plan (111) et des trois directions de glissement de celui-ci* $\vec{l} = (10\bar{1}), (0\bar{1}1), (\bar{1}10)$.

Dans le cas des superalliages, le matériau est très loin de son état pur et il est important de comprendre quelles sont les interactions entre les dislocations et le matériau hétérogène. Prises seules, les deux phases ont des limites d'élasticité très différentes. La phase γ sera dite ductile et les dislocations se formeront dans celle-ci. Les obstacles peuvent donc être des atomes en solution, les précipités (majoritairement γ') ou d'autres dislocations. Les différents modes de durcissement sont détaillés ci-dessous.

Durcissement par solution solide. A l'approche d'une singularité de type addition/remplacement d'un atome, l'énergie nécessaire au franchissement est plus élevée : la dislocation est alors épinglée. Cette augmentation locale de l'énergie de franchissement dépend essentiellement de l'ampleur du champ mécanique généré par l'inclusion (l'atome), qui dépend de son rayon atomique. De manière simple, plus l'atome en solution solide est « gros » et plus le durcissement solide est important. Pour certaines températures et vitesses de chargement, lorsqu'une dislocation réussit à se décrocher d'un atome en solution, celui-ci peut la rattraper à nouveau car attiré par le champ mécanique de la dislocation. Macroscopiquement et uniquement dans une gamme restreinte de température, on voit des oscillations sur la charge durant un essai de traction : on parle d'effet Portevin-Le Chatelier (PLC) [Garat et al., 2008, Mazière et al., 2008].

Durcissement par précipitation. C'est la microstructure biphasée γ/γ' qui confère de bonnes propriétés mécaniques à ce type d'alliage. Les précipités vont jouer le rôle d'obstacles majoritaires à la progression des dislocations. Trois grands mécanismes peuvent être considérés. Le plus intuitif consiste à cisailler le précipité et donc à « ouvrir la voie pour les autres dislocations ». La phase durcissante étant cohérente avec la matrice, un autre mécanisme actif est le glissement dévié ou de montée [François et al., 1993]. Enfin, la dislocation peut entourer le précipité et, lorsque les deux bouts de la dislocation se

rejoignent, ils se combinent en laissant une boucle d'Orowan. Les trois types de mécanismes peuvent être observés dans les superalliages base nickel avec des proportions qui dépendent de la taille des précipités, du chargement, de la température, ...

Durcissement par écrouissage. Il s'agit d'interaction entre des dislocations. Certaines jouent le rôle d'obstacles durs (systèmes sécants) alors que d'autres interagissent à distance. Pour les interactions répulsives, trois cas peuvent être dissociés :

- auto-écrouissant entre deux dislocations de même système de glissement ;
- colinéaire pour deux dislocations de même direction de glissement ;
- coplanaire pour deux dislocations de même plan de glissement.

Pour ce qui est des obstacles sécants, on parle souvent du « mécanisme de la forêt », où les dislocations sécantes sont appelées « arbres de la forêt » [Madec, 2001]. On peut citer trois types de « verrouillage » conduisant au durcissement du matériau. On introduit les termes de « jonction sessile » correspondant à une immobilité de la dislocation qui s'oppose à une jonction glissile. Cela dépend notamment de la somme des deux vecteurs de Burgers des dislocations concidérées : on dissociera ainsi le verrou de Lomer (jonction sessile) du verrou de Hirth (jonction sessile) et la jonction glissile.

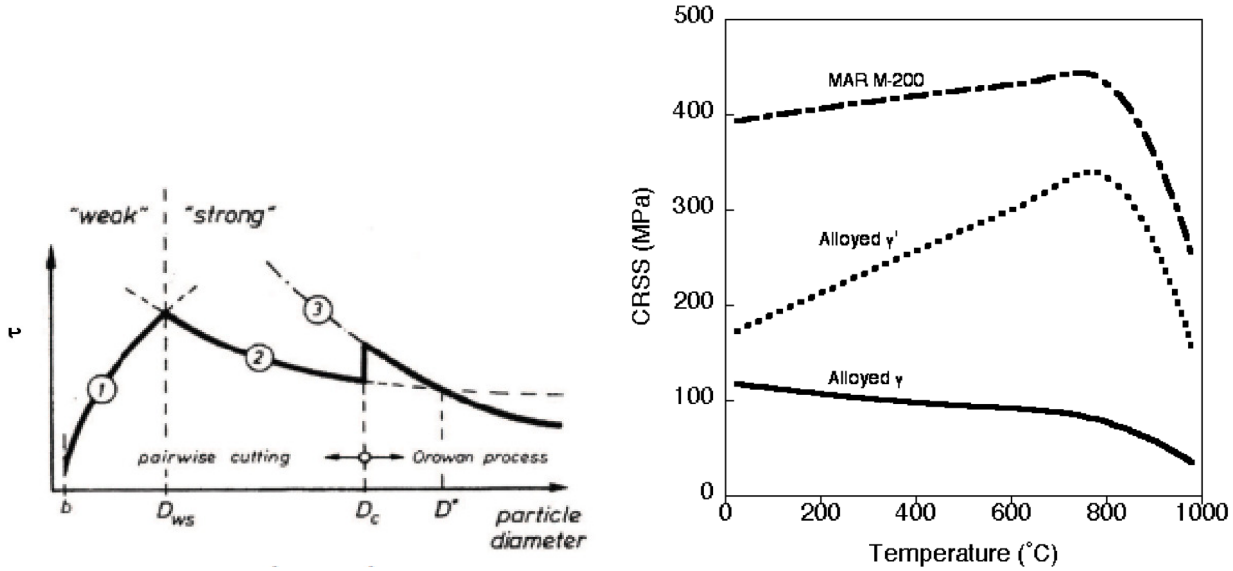
1.1.4 Prépondérance des types de durcissement en fonction de la température

Les phénomènes mécaniques opérant au sein de ce type d'alliage ont été introduits de manière succincte. D'une part, il faut mentionner l'effet plus faible du durcissement par solution solide vis-à-vis des deux autres types de durcissement. D'autre part, la quantification du rôle de chacun va directement dépendre du type de chargement considéré. Limitons-nous à une température et une charge appliquée pour la définition du chargement, même si la vitesse de chargement peut avoir également son importance dans certains cas.

- A basse température, les dislocations s'accumulent dans les canaux γ et les précipités bloquent leur progression. Pour une certaine charge [1], les précipités vont être cisaillés ; alors ils n'empêcheront plus le passage des autres dislocations. Cette charge, qui se rapproche de la limité d'élasticité macroscopique, dépend essentiellement de la taille des précipités γ' (Fig 1.4). Par conséquent, l'ensemble du matériau composite γ/γ' va se déformer, créant un champ de déformation relativement homogène au sein du matériau. Un autre constat sur les propriétés mécaniques concerne la limite d'élasticité qui reste stable, voire croît pour certaines gammes d'alliages monogranulaires, lorsque la température augmente, et ce jusqu'à une température élevée, de l'ordre de 700-800 °C.

1. En réalité, le cisaillement des précipités γ' fait référence à des mécanismes plus complexes introduisant la nécessité d'avoir deux dislocations de même type (le lecteur pourra se référer à la partie 2.3.1 « Strengthening by particles of the gamma prime phase » de [Reed, 2006])

- A haute température (au-delà de 900 °C), de nouveaux phénomènes modifient l'interface γ/γ' et le mode de déformation qui en découle. Premièrement, les deux phases ont des coefficients de dilatation thermique différents qui tendent à accroître l'ampleur de la distorsion élastique. Une activité plastique peut même intervenir à l'interface à très haute température sans chargement mécanique. Cela « protège » le précipité vis-à-vis du cisaillement au profit du contournement ou du mécanisme d'Orowan. Ce dernier est en particulier fréquent à faible charge et haute température. Deuxièmement, une évolution de la structure de précipitation est observée à haute température, qui peut-être accélérée par l'application d'une charge. Les précipités de forme cuboïdale coalescent dans une certaine direction (on parle de « P raft » et « N raft »), qui est fonction de la direction de sollicitation : ce phénomène est communément appelé « mise en radeaux » ou coalescence orientée. Finalement, le labyrinthe γ/γ' laisse place à une microstructure lamellaire favorisant le mouvement des dislocations. A cela s'ajoute une diminution de la fraction volumique de γ' qui revient en solution dans la matrice, réduisant le durcissement par précipitation. De ce fait, on observe une forte chute de la limite d'élasticité à haute et très haute température.



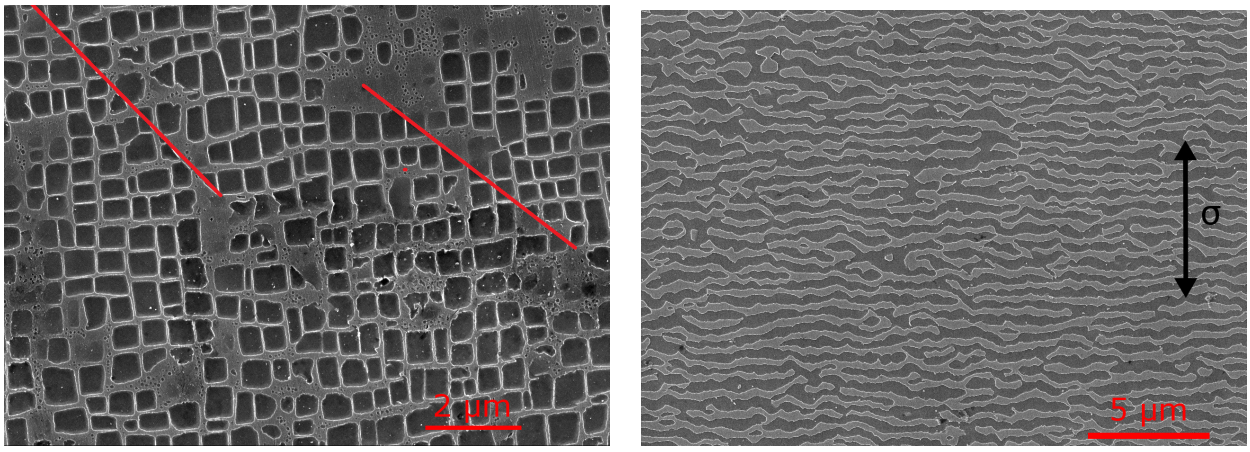
a. b.

Figure 1.4 – *a. Mécanismes prépondérants dans le durcissement par précipitation et charge à appliquer en fonction de la taille des précipités γ'. b. Evolution des limites d'élasticité pour les phases γ et γ' seules et le superalliage base-nickel monocristallin MarM200 en fonction de la température [Pollock and Tin, 2006].*

Pour des températures intermédiaires (700-800 °C), des mécanismes plus complexes sont mis en jeu et nécessitent un traitement particulier. Cela ne sera pas le sujet de cette thèse, qui est consacrée aux deux régimes asymptotiques : basse et haute température.

1.2 Modèle décrivant le comportement mécanique du monocristal

Les modèles macroscopiques qui s'attachent à obtenir une formulation phénoménologique du comportement mécanique à l'aide d'une seule fonction de charge, sont difficilement appli-



a. b.

Figure 1.5 – *a. Bandes de cisaillement (traits vert) visibles après un essai de fluage de 2,1 h à 750 °C et 800 MPa sur du DS200 sollicité en direction transverse [Mataveli Suave, 2017]. b. Mise en radeaux après un essai de fluage d'environ 770 h à 900 °C et 250 MPa sur un monocristal MarM200+Hf orienté <001> [Mataveli Suave, 2017] (la zone la plus sombre sur les deux images représente la phase γ').*

cables. En effet, si dans le cas d'un polycrystal non texturé ou globalement homogène, les phénomènes physiques se déroulant aux échelles plus locales sont « noyés » par le grand nombre de grains qui « moyennent » le comportement, ce n'est pas le cas pour un monocristal, où il est *a priori* nécessaire de traduire principalement les mécanismes liés aux systèmes de glissement spécifiques des phases présentes. Une nouvelle description du comportement mécanique des matériaux s'est développée dans la seconde moitié du XX^{e} siècle, appelée la plasticité cristalline. Elle est maintenant largement popularisée, et utilisée non plus uniquement pour le monocristal mais aussi pour le polycristal comme nous le verrons par la suite.

1.2.1 Définition de la limite d'élasticité et comportement en plasticité parfaite

Pour l'étude d'un grain seul, ce sont les phénomènes physiques locaux liés au glissement du réseau cristallin qui pilotent la déformation au sein du matériau : les systèmes de glissement semblent être l'outil idéal pour la modélisation. Nous avons vu précédemment que la maille cristalline est CFC pour les alliages à base nickel et que les plans denses, où le glissement se produira de manière privilégiée, sont les plans octaédriques. Il est souvent proposé de rajouter les systèmes cubiques pour caractériser les phénomènes de glissement déviés sur les plans octaédriques, qui s'apparentent macroscopiquement à des glissements cubiques (sous la condition d'avoir suffisamment de données expérimentales pour calibrer leur comportement mécanique notamment avec des monocristaux d'orientation <111>). Etant donné que l'étude s'intéresse au matériau à solidification dirigée, il n'existe pas *a priori* de grains de type <111> (la direction X_3 du repère des sollicitations macroscopiques est normale à une face du cube de la maille CFC). Il faudrait alors réaliser des essais de torsion. Avec les informations recueillies sur le comportement du monocristal, nous n'introduirons pas les systèmes de glissement cubiques. Ils pourraient être facilement rajoutés *a posteriori* avec des essais adaptés.

L'idée de départ de la plasticité cristalline est de proposer une contrainte équivalente caractérisant l'intensité du cisaillement sur le système de glissement considéré. Le tenseur des

contraintes macroscopiques permet de calculer le vecteur contrainte sur chaque plan de glissement. Celui-ci est ensuite projeté sur chacune des directions de glissement. Le scalaire qui en résulte, appelé « cission résolue » et noté τ^s pour le système s, a été défini par **Schmid**. Pour un système s donné, le critère de **Schmid** consiste à écrire qu'il existe une valeur critique τ_c, nommée cission résolue critique (ou critical resolved shear stress, CRSS) à partir de laquelle le glissement est activé. On suppose classiquement que la valeur de τ_c est identique pour tous les systèmes d'une même famille. Ceci conduit à introduire une fonction de charge f^s, qui s'écrit en l'absence d'écrouissage :

$$f^s = |\tau^s| - \tau_c \quad \forall s \in [1, 12] \tag{1.2}$$

En petites déformations, c'est le tenseur d'orientation, $\underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^s$, partie symétrique du produit tensoriel de $\vec{n}^s$ et $\vec{l}^s$ qui permet de calculer la cission résolue :

$$\tau^s = \underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^s : \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \text{ avec } \underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^s = \frac{1}{2}(\vec{n}^s \otimes \vec{l}^s + \vec{l}^s \otimes \vec{n}^s) \tag{1.3}$$

Les normales aux plans de glissement $\vec{n}^s$, les directions de glissement $\vec{l}^s$ et les tenseurs d'orientation sont donnés dans le tableau 1.2 pour un matériau CFC, dans le repère cristallographique.

$n^s\sqrt{3}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1
	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1
	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	1
$l^s\sqrt{2}$	-1	0	-1	-1	0	1	-1	1	0	0	1	1
	0	-1	1	0	1	1	1	0	1	-1	1	0
	1	1	0	1	1	0	0	1	1	1	0	1
$\sqrt{6}m_{11}$	-1	0	-1	-1	0	1	-1	1	0	0	-1	-1
$\sqrt{6}m_{22}$	0	-1	1	0	-1	-1	1	0	1	-1	1	0
$\sqrt{6}m_{33}$	1	1	0	1	1	0	0	-1	-1	1	0	1
$2\sqrt{3}m_{12}$	-1	-1	0	1	1	0	0	1	1	1	0	1
$2\sqrt{3}m_{23}$	1	0	1	-1	0	1	-1	1	0	0	1	1
$2\sqrt{3}m_{31}$	0	1	-1	0	1	1	1	0	1	-1	1	0

Table 1.2 – *Inventaire des normales aux plans de glissement $\vec{n}^s$, des directions de glissement $\vec{l}^s$ et des tenseurs d'orientation $\underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^s$ pour les douze systèmes octaédriques.*

On est donc en présence d'un modèle à critères multiples, qui définit l'état du matériau au travers de 12 conditions (pour le matériau CFC) :

- domaine élastique si : $\forall s \in [1, 12], |\tau^s| - \tau_c = f^s < 0$
- décharge élastique si : $\forall s \in [1, 12], f^s = 0$ et $\dot{f}^s < 0$
- écoulement plastique si : $\exists s \in [1, 12], f^s = 0$ et $\dot{f}^s = 0$

Dans le cas simple où les seules composantes non nulles du tenseur de contrainte dans le repère cristallographique sont σ_{11} et σ_{22}, les douze équations se ramènent à :

$$\begin{cases} \pm\dfrac{1}{\sqrt{6}}\sigma_{11} = \tau_c \\ \pm\dfrac{1}{\sqrt{6}}\sigma_{22} = \tau_c \\ \pm(\dfrac{1}{\sqrt{6}}\sigma_{11} - \dfrac{1}{\sqrt{6}}\sigma_{22}) = \tau_c \end{cases} \tag{1.4}$$

La surface de charge résultante, continue par morceaux, s'apparente à l'hexagone trouvé avec le critère de **Tresca** dilaté de $\sqrt{6}/2$. Utilisant les 3 angles d'Euler comme définis sur la figure 1.6, on peut tracer le domaine d'élasticité dans le cas où le chargement (les seules composantes non nulles sont σ_{11} et σ_{22}) à un grain dont le repère cristallographique est différent du repère de charge.

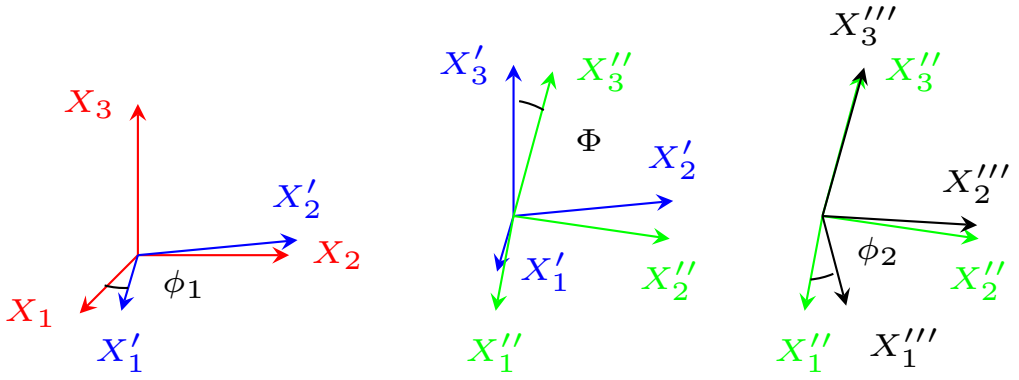


Figure 1.6 – *Définition des trois angles d'Euler utilisée dans la thèse : rotations successive autour de X_3 / X_1' / X_3''*

En notant $[\sigma]$ la matrice $\begin{pmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$, $[m_0^s]$ la matrice représentant le tenseur d'orientation du système s dans le repère cristallographique et $[P]$ la matrice de passage du repère de chargement au repère cristallographique, on peut exprimer la matrice $[m^s]$ représentant le tenseur d'orientation du système s et τ^s par :

$$\begin{aligned} [m^s] &= [P]\,[m_0^s]\,[P]^{-1} \\ \tau^s &= [m^s]\,[\sigma] \end{aligned} \tag{1.5}$$

Le système d'équations devient plus complexe à résoudre analytiquement. En figure 1.7, quelques surfaces de charge pour des configurations « classiques » sont représentées dans plusieurs plans des contraintes.

Sur cette figure, l'évolution des surfaces de charge en fonction d'un seul angle d'Euler ϕ_1 est représentée, Φ et ϕ_2 étant maintenus à zéro (caractérisant les seules orientations existantes dans un matériau DS parfait). Dans ce cas simplifié, une écriture analytique du système d'équation

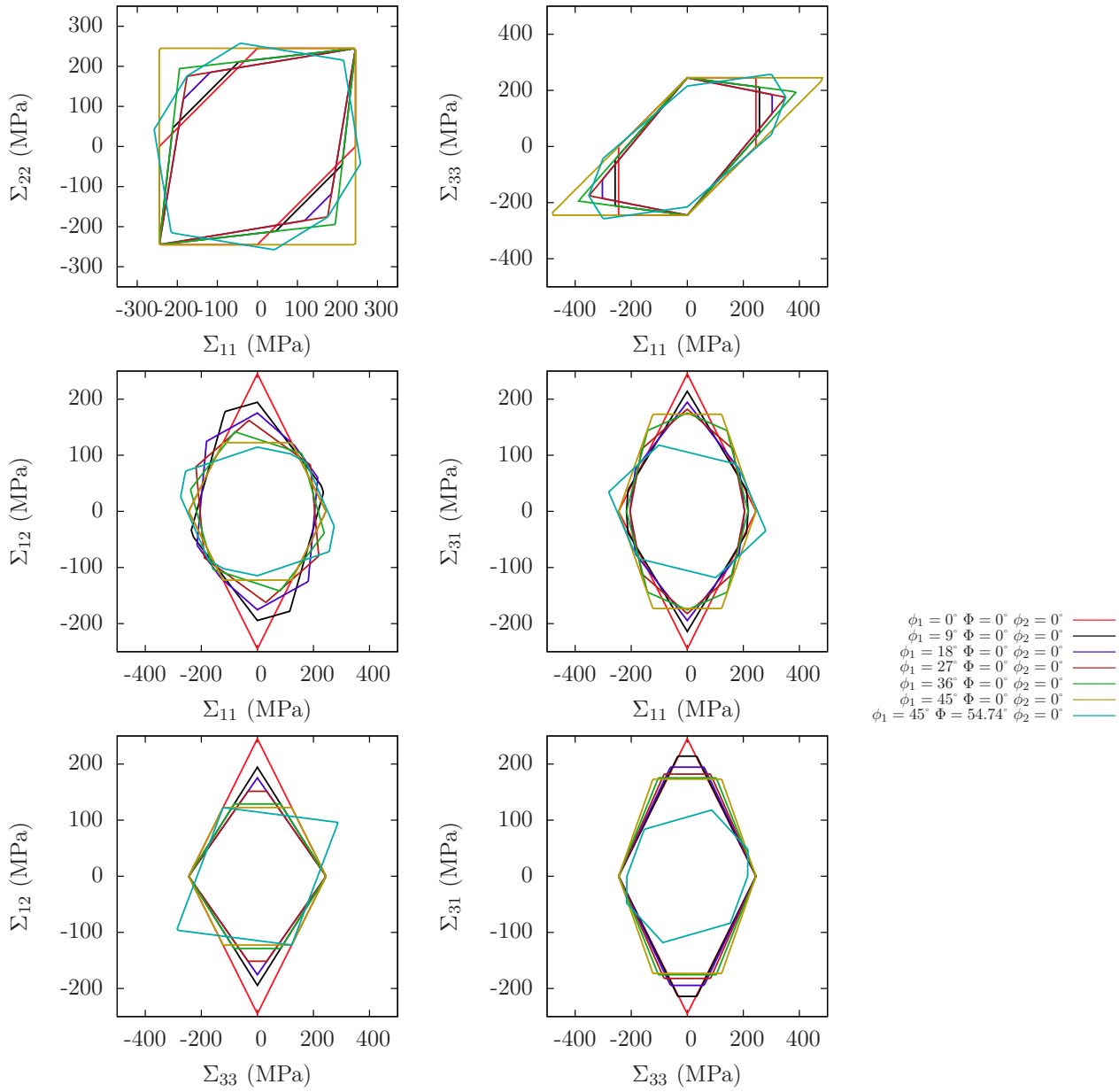


Figure 1.7 – *Surfaces de charge pour différents cas d'orientation du monocristal et les conditions :* τ_c =100 MPa, *offset* = 10^{-6} *et incrément utilisé pour le tracé de* 1°.

a été explicitée dans [Sai et al., 2006]. Les différentes figures présentées en 1.7 illustrent l'anisotropie forte du seuil de plasticité d'un monocristal en fonction de sa cristallographie. Cela va se répercuter directement sur les directions d'écoulement plastique.

Une des difficultés du problème de définition de l'écoulement plastique réside dans le choix des systèmes actifs au niveau des points singuliers de la surface de charge. En effet, pour ces états de contraintes, la règle de normalité ne suffit plus puisqu'il existe une infinité de solutions comprises entre les deux normales asymptotiques. Les deux premières solutions pour résoudre l'ambiguïté, équivalente dans certaines conditions d'écrouissage, consistent à définir un jeu de multiplicateurs plastiques afin de quantifier les systèmes actifs de manière à minimiser l'énergie dissipée (puissance des efforts internes) [Taylor, 1938] ou à maximiser le travail plastique [Bishop and Hill, 1951]. La première tend à rechercher un jeu de vitesses de glissement des systèmes activés solution du problème de minimisation alors que la seconde recherche un état de contrainte. Même si le chargement de départ possède une unicité dans la solution de l'écoulement plastique, la règle de normalité « dirige » l'écoulement vers un point anguleux de la surface de charge [Busso and Cailletaud, 2005]. Le problème de non-unicité devra être traité indépendamment du trajet de chargement considéré au départ. Dans [Busso and Cailletaud, 2005], les auteurs ont montré que, suivant la méthode utilisée pour lever l'indétermination sur la sélection des systèmes actifs et/ou la résolution numérique utilisée, les résultats obtenus sur des chargements complexes peuvent être différents. Pour permettre une plus grande liberté dans le choix des dérivées partielles qu'on veut utiliser pour décrire la plasticité et l'écrouissage, une solution consiste à considérer un comportement viscoplastique qui autorise des points de fonctionnement pour lesquels $f^s > 0$, ce qui « régularise » la surface de charge.

Introduction de la dépendance à la vitesse de chargement

Le cadre de travail théorique de la plasticité cristalline a été initié par les travaux de **Mandel** [Mandel, 1966,Mandel, 1965] qui généralise « le potentiel multiple de **Koiter** », et les travaux de **Hill** [Hill, 1966]. Finalement, la plasticité cristalline est un cas d'application de la formulation générale des potentiels multi-mécanismes [Mandel, 1973] où chaque glissement constitue un mécanisme de déformation et contribue à la déformation plastique macroscopique. Ce cadre permet d'introduire rigoureusement l'écrouissage sur chaque système et inter-système (en détail dans la partie suivante) mais aussi la dépendance à la vitesse de chargement. Les travaux de **Rice** puis de **Peirce** ont largement contribué à l'étude théorique du cadre thermodynamique adapté à la plasticité cristalline [Rice, 1970,Rice, 1971,Peirce et al., 1983] et à sa popularisation. De manière simple, ce potentiel suppose une fonction, trouvée à partir des fonctions de charge f^s définies précédemment, positive et respectant la condition sur l'écoulement plastique : $\Omega = 0$ si $f^s \leq 0$. Pour une vitesse de chargement infinitésimale, la fonction se ramène au cas indépendant du temps décrit précédemment. Une expression simple et largement utilisée de ce potentiel est la loi puissance donnant :

$$\Omega = \sum_s \Omega^s(f^s) = \frac{K}{n+1} \sum_s \left\langle \frac{f^s}{K} \right\rangle^{n+1} \tag{1.6}$$

avec $\langle x \rangle$ =max$(0, x)$. L'écoulement plastique se définit en dérivant ce potentiel par rapport au tenseur des contraintes (règle de normalité de l'écoulement) :

$$\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{\mathrm{p}} = \sum_s \frac{\delta \Omega^s}{\delta \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}} \tag{1.7}$$

La dérivée partielle se décompose en un produit de deux termes faisant apparaître un scalaire $\dot{v}^s$ qui représente l'intensité de la vitesse de glissement sur le système s, et un tenseur qui traduira la direction de glissement :

$$\dot{v}^s = \frac{\delta\Omega^s}{\delta f^s} = \left\langle \frac{f^s}{K} \right\rangle^n \qquad \frac{\delta f^s}{\delta \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}} = \frac{\delta(|\underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^s : \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}| - \tau_c)}{\delta \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^s \eta^s \tag{1.8}$$

où $\eta^s \in \{-1; 1\}$ désigne le signe de τ^s. Le scalaire $\dot{v}^s$ est toujours positif sur les systèmes présentant un écoulement viscoplastique. On introduit également la vitesse de glissement, $\dot{\gamma}^s$ sur le système s :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{v}^s \eta^s \tag{1.9}$$

qui possède donc le même signe que τ^s. Pour une valeur donnée de la vitesse de déformation plastique, on peut tracer une équipotentielle, qui est d'autant plus éloignée du domaine d'élasticité que la vitesse est grande (Fig 1.8), et qui présente des coins « arrondis », caractéristiques de la régularisation signalée plus haut.

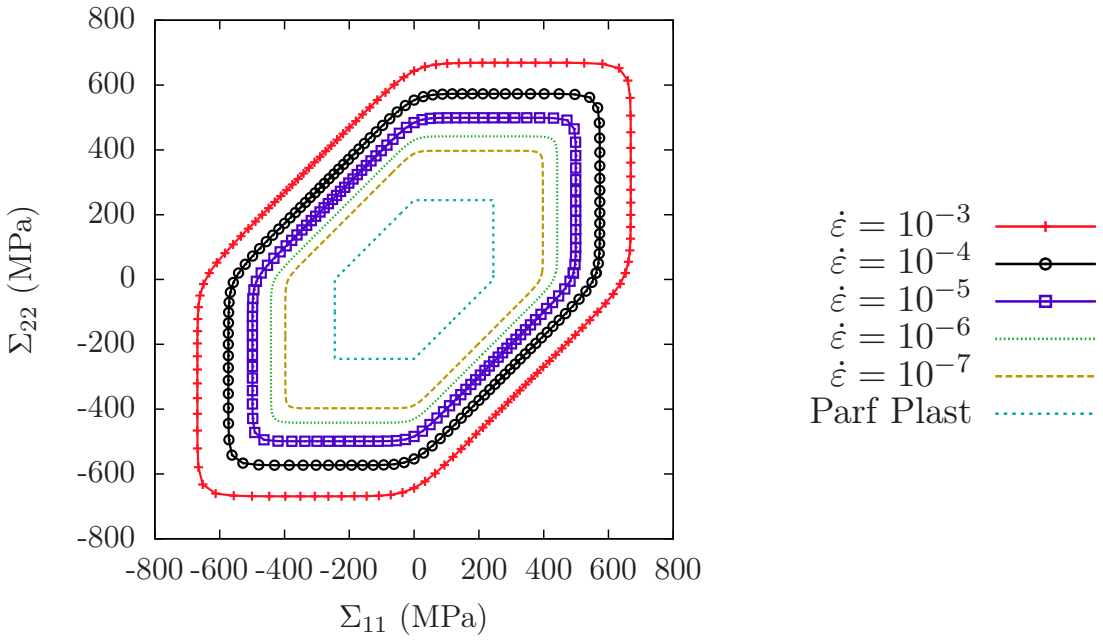


Figure 1.8 – *Evolution du domaine viscoplastique en fonction de la vitesse de sollicitation pour les paramètres : $\tau_c = 100$ MPa, $n = 9$ et $K = 400$ MPa.s$^{1/n}$.*

Cette hypothèse de travail ne pose pas de réel problème en pratique, puisque la grande majorité des matériaux métalliques ont une dépendance à la vitesse de chargement [François et al., 1998]. La surcontrainte visqueuse ainsi définie dépend de la vitesse de déformation au travers de la fonction puissance choisie pour exprimer le potentiel.

Cette formulation reste trop simple si on souhaite couvrir une large gamme de vitesse. En particulier sur l'AM1, l'influence de la vitesse a tendance à diminuer pour des valeurs supérieures à $10^{-3}\,\mathrm{s}^{-1}$. Dans ce cas, il est possible de combiner plusieurs potentiels viscoplastiques, chacun étant lui aussi multi-mécanismes. Par exemple, certains modèles pour les superalliages base-nickel utilisent deux potentiels à haute température pour traduire une dépendance au temps différente en fluage/relaxation (sollicitation lente) et en traction (sollicitation rapide). Par ailleurs, pour des vitesses supérieures à $10^{-3}\,\mathrm{s}^{-1}$, la relation contrainte/vitesse de chargement se rapproche d'une exponentielle (saturation aux fortes vitesses). Une façon d'étendre la

validité du modèle viscoplastique consiste alors à utiliser une loi en sinus hyperbolique telle que :

$$\dot{v}^s = B \sinh(\frac{f^s}{A}) \tag{1.10}$$

Le potentiel viscoplastique s'écrit alors simplement :

$$\Omega^s = AB \cosh(\frac{f^s}{A}) \tag{1.11}$$

Ce type de formulation a été utilisé pour modéliser le comportement en fluage et relaxation à haute température de l'AM1 [Gaubert, 2009]. Cette dépendance en sinus hyperbolique peut même être complexifiée en ajoutant une loi puissance à l'intérieur du $\sinh$. A l'inverse, à basse température, les alliages à base nickel vont avoir une faible dépendance à la vitesse de sollicitation dans la gamme 10^{-8}-$10^{-3}\mathrm{s}^{-1}$. Cela nous amène à utiliser les modèles viscoplastiques dans le domaine « quasi-indépendant » du temps. Dans un tel cas, la convergence du calcul est altérée, générant des temps CPU qui peuvent devenir inacceptables pour les problèmes sur une structure 3D. Dans certains cas, il sera alors judicieux d'utiliser un modèle véritablement indépendant du temps au lieu d'essayer d'obtenir une quasi-indépendance numérique en augmentant largement la valeur de l'exposant n. De nombreux développements ont été menés en ce sens.

Autres formulations pour la plasticité indépendante du temps

Le problème initial dans l'approche indépendante du temps concerne directement le critère de Schmid, qui par construction est continu par morceaux. De nombreux travaux ont ainsi consisté à régulariser ce critère afin de le rendre continu. Par exemple, par l'intermédiaire d'une puissance [Gambin, 1991]. On obtient :

$$f = \left[\sum_s (\frac{\tau^s}{\tau_c})^{2N} \right]^{\frac{1}{2N}} - 1 \tag{1.12}$$

L'avantage de la méthode est de conserver le formalisme de la plasticité cristalline introduisant la cission résolue. Néanmoins, on perd alors la notion d'activation des systèmes de glissement (modèle mono-critère). Cela a des répercutions quand on souhaite ajouter l'écrouissage latent, qui traduit le durcissement inter-systèmes proposé par [Franciosi et al., 1980] puisqu'on ne dissocie pas les systèmes de glissement. On retrouve le critère de **Schmid** lorsque N tend vers l'infini.

Il est aussi possible de chercher un critère phénoménologique continu équivalent. On cherche alors une fonction basée sur les invariants du tenseur des contraintes respectant la symétrie cubique. Les expressions sont données dans le repère cristallographique. Un exemple d'expression utilisée pour les alliages base nickel est [Nouailhas and Cailletaud, 1992] :

$$f = \left[\left[\left(\frac{3}{2}(I_2 + 2a_4 I_4) \right)^2 + 3a_8 I_8 \right]^3 - (a_6 I_6)^4 \right]^{1/12} - R \tag{1.13}$$

où R, a_4,a_8 et a_6 sont des paramètres matériau et I_2, I_4, I_8 et I_6 sont des invariants tels que :

$$\begin{cases} I_2 &= \sigma'^2_{11} + \sigma'^2_{22} + \sigma'^2_{33} \\ I_4 &= \sigma'^2_{23} + \sigma'^2_{12} + \sigma'^2_{31} \\ I_6 &= \sigma'^2_{23}\sigma'^2_{12}\sigma'^2_{31} \\ I_8 &= \sigma'^4_{23} + \sigma'^4_{12} + \sigma'^4_{31} \end{cases} \tag{1.14}$$

et $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}'$ est la partie déviatorique du tenseur des contraintes.

Une approche récente est proposée par **Rubin et al** pour régulariser le critère de **Schmid** sans perdre la formulation multi-critère (contrairement au critère de **Gambin**). L'idée de départ consiste à supposer deux régimes, une « micro plasticité » qui intervient dès qu'un système s'active et un régime stationnaire. On peut écrire la vitesse de glissement sur le système s selon [Forest and Rubin, 2016] :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}^0_s(\frac{f^s}{R})\eta^s \tag{1.15}$$

où $\dot{\gamma}^0_s$ représente un « taux de déformation équivalent » positif et R un paramètre à identifier. Les auteurs proposent d'utiliser :

$$\dot{\gamma}^0_s = |\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}} : m^s| \tag{1.16}$$

La transition entre ces deux états peut être choisie en fonction d'une courbe expérimentale de traction ou bien de manière équivalente à la contrainte visqueuse pour une vitesse de sollicitation donnée. En particulier, une équivalence simple (monocristal CFC) est obtenue entre ces deux « surcontraintes » pour une loi d'écoulement visqueuse exprimée avec une fonction puissance et une vitesse de chargement en traction simple, $\dot{\varepsilon}$ [Forest and Rubin, 2016] :

$$R = \frac{8}{6}K\left[\frac{\sqrt{6}\dot{\varepsilon}}{8}\right]^{\frac{1}{n}} \tag{1.17}$$

Un avantage de la méthode est de simplifier l'introduction de l'écrouissage dans le modèle, en particulier les durcissements entre systèmes de glissement car le modèle conserve explicitement l'aspect multi-critère originel. Même si dans notre étude, une loi puissance sera ajoutée afin de traduire la dépendance à la vitesse de chargement, cette solution nommée « SRIX » par les auteurs pourrait être utilisée à faible température sur les superalliages base nickel car la viscosité n'impacte que très faiblement le comportement mécanique.

1.2.2 Variables d'écrouissage

Outre sa rigidité initiale, le matériau va se durcir au cours de l'écoulement plastique. D'un point de vue métallurgique, cela se traduit par l'évolution au cours du temps des obstacles que rencontrent les dislocations durant leur parcours. En mécanique, on peut traduire cela par une évolution de la surface de charge initiale dans l'espace des contraintes, qui est fonction de l'histoire du chargement. Cette évolution est pilotée par des variables d'écrouissage, qui peuvent selon le type de modèle, avoir une expression purement phénoménologique, basée sur la forme des boucles, ou faire référence à des mécanismes physiques faisant intervenir de façon explicite les densités de dislocations. De nombreux modèles existent dans la littérature, faisant le choix d'un des deux formalismes précédents. L'objectif de cette partie n'est pas de

réaliser un bestiaire de tous les types de durcissement pouvant être modélisés, mais de regarder le fonctionnement général en ciblant deux modèles précédemment sélectionnés pour les superalliages à base nickel : celui de **Méric** et **Cailletaud** [Méric and Cailletaud, 1991] et celui de **Ma** et **Roters** [Ma and Roters, 2004].

Vision phénoménologique de l'écrouissage : modèle de Cailletaud

L'écrouissage peut être perçu comme une modification de la fonction seuil induite par une déformation inélastique irréversible. De façon pragmatique, l'évolution du domaine d'élasticité pour un système donné dans l'espace des cissions résolues peut être décomposé en deux mouvements élémentaires de dilatation et translation. Pour cela, la fonction de charge sur chaque système est enrichie par des variables internes scalaires initialement nulles, modifiant la position du centre du domaine d'élasticité et sa taille [Cailletaud, 1987] :

$$f^s = |\tau^s - x^s| - \tau_c - r^s \tag{1.18}$$

La variable x^s désigne l'écrouissage cinématique, et la variable r^s l'écrouissage isotrope. Chacune de ces variables a une évolution non linéaire en fonction du glissement plastique [Méric et al., 1991] :

$$\begin{cases} r^s &= \sum_j Q \underset{\sim}{\boldsymbol{H}}^{js}(1 - e^{-bv^j}) \\ x^s &= c\alpha^s, \text{ avec } \dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d\dot{v}^s\alpha^s \end{cases} \tag{1.19}$$

L'expression de l'écrouissage cinématique est une extension de l'évolution proposée dans [Frederick and Armstrong, 2007] pour rendre compte de l'effet **Bauschinger**. L'écrouissage isotrope traduit le durcissement provoqué par les interactions entre dislocations. Le terme $\underset{\sim}{\boldsymbol{H}}^{js}$ représente l'écrouissage latent entre les systèmes de glissement [Franciosi, 1985, Kocks and Brown, 1966]. Pour les matériaux CFC, en ne considérant que les systèmes octaédriques, la matrice $\underset{\sim}{\boldsymbol{H}}^{js}$ est carrée de taille 12x12 avec 6 termes indépendants traduisant les 6 combinaisons différentes entre dislocations définies dans la partie précédente (voir le tableau 1.3).

$(111)[\bar{1}01]$	h1	h2	h2	h4	h5	h5	h5	h6	h3	h5	h3	h6
$(111)[0\bar{1}1]$	h2	h1	h2	h5	h3	h6	h4	h5	h5	h5	h6	h3
$(111)[\bar{1}10]$	h2	h2	h1	h5	h6	h3	h5	h3	h6	h4	h5	h5
$(1\bar{1}1)[\bar{1}01]$	h4	h5	h5	h1	h2	h2	h6	h5	h3	h6	h3	h5
$(1\bar{1}1)[011]$	h5	h3	h6	h2	h1	h2	h3	h5	h6	h5	h5	h4
$(1\bar{1}1)[110]$	h5	h6	h3	h2	h2	h1	h5	h4	h5	h3	h6	h5
$(\bar{1}11)[0\bar{1}1]$	h5	h4	h5	h6	h3	h5	h1	h2	h2	h6	h5	h3
$(\bar{1}11)[110]$	h6	h5	h3	h5	h5	h4	h2	h1	h2	h3	h5	h6
$(\bar{1}11)[101]$	h3	h5	h6	h3	h6	h5	h2	h2	h1	h5	h4	h5
$(11\bar{1})[\bar{1}10]$	h5	h5	h4	h6	h5	h3	h6	h3	h5	h1	h2	h2
$(11\bar{1})[101]$	h3	h6	h5	h3	h5	h6	h5	h5	h4	h2	h1	h2
$(11\bar{1})[011]$	h6	h3	h5	h5	h4	h5	h3	h6	h5	h2	h2	h1

Table 1.3 – *Structure de la matrice d'interaction H^{js} pour les 12 systèmes de glissement octaédriques de la maille CFC*

Les valeurs qui doivent être assignées à chaque composante sont difficilement accessibles et la littérature fournit à leur sujet des informations contradictoires. **Méric** [Méric et al., 1991]

utilise des valeurs croissantes de h_1 à h_6. Des essais complexes non-proportionnels ont été mis en place dans [Gérard et al.,] afin de recaler ces valeurs au travers de l'effet de l'écrouissage latent. D'autre part, les développements récents basés sur la Dynamique des Dislocations (DD) ont permis d'évaluer plus rigoureusement et de quantifier les différentes interactions entre dislocations dans les alliages CFC. En particulier, les valeurs fournies par des simulations DD dans [Devincre et al.,] ont été testées sur un polycristal de cuivre laminé dans [Gérard et al., 2013]. Pour les superalliages à base nickel, ces interactions sont moins marquées que pour le cuivre, et, le phénomène de durcissement/adoucissement cyclique étant faible, les valeurs des termes de la matrice jouent un rôle relativement limité. Pour les basses température ($650\,°\mathrm{C}$), les dislocations sont confinées dans les canaux de matrice γ et la plasticité sera majoritairement régie par le cisaillement des précipités. Il est de coutume de prendre la matrice identité ou la matrice unité, voire plutôt ne pas prendre en compte l'écrouissage isotrope.

D'autres solutions ont été proposées dans la littérature sur la manière d'incorporer les variables internes. En particulier, l'écrouissage isotrope r^s peut être introduit sous une forme multiplicative (au lieu d'être additive). Le modèle d'**Asaro** [Asaro, 1983, Asaro and Needleman, 1985], très utilisé et qui est construit « sans seuil », définit l'intensité du glissement selon :

$$\dot{v}^s = \left| \frac{\tau^s}{r^s} \right|^n \tag{1.20}$$

Les systèmes sont toujours activés, on choisit alors la variable r^s pour que le glissement soit négligeable jusqu'à une certaine valeur de cission résolue. Cette formulation a été complexifiée en ajoutant l'écrouissage cinématique comme précédemment et en modifiant l'expression de r^s (par exemple dans [Anand and Kothari, 1996, McGinty, 2001]). Enfin, il existe également des expressions introduisant la dépendance à la température. Une relation largement utilisée dans la littérature, proposée par **Busso** et **McClintock** [Busso and McClintock, 1996, Busso et al., 2000], s'écrit :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}^0 \exp\left(-\frac{F_0}{K_B \theta} \left[1 - \left\langle \frac{|\tau^s| - r^s \mu \mu_0^{-1}}{\tau_c} \right\rangle^p \right]^q \right) signe(\tau^s) \tag{1.21}$$

où F_0 représente l'énergie libre d'**Helmholtz** à $0\,\mathrm{K}$, K_B la constante de **Boltzmann**, θ la température en K, μ le coefficient de cisaillement et μ_0 celui à $0\,\mathrm{K}$. Le modèle a été utilisé plus récemment afin de prédire les joints de grains propices à la formation de micro-fissures sur un alliage d'aluminium polycristallin dans [Pouillier et al., 2012]. Pour finir, une comparaison de plusieurs modèles avec les deux types de durcissement a été réalisée dans [Busso and Cailletaud, 2005]. En conclusion, l'avantage dans la représentation phénoménologique est sa modularité. Il est possible d'ajouter facilement d'autres termes aux variables internes présentées ou même d'autres variables internes « à la demande » pour traduire la complexité des phénomènes rencontrés dans le matériau.

Variables internes représentant des densités de dislocations

Les développements récents sur l'observation et la compréhension des mécanismes de la plasticité à l'échelle des dislocations dans les métaux permettent d'introduire des variables internes plus proches des mécanismes physiques. La construction générale du modèle reste similaire mais les variables d'écrouissage se réfèrent maintenant à des quantités de dislocations présentes au sein du matériau. Par exemple, le modèle de **Tabourot et al** [Tabourot et al., 1997]

reprend l'expression du glissement donnée en 1.20 avec :

$$r^s = \alpha b \mu \sqrt{\sum_j h_{sj} \rho^j} \tag{1.22}$$

où b représente l'intensité du vecteur de **Burgers** de direction $\vec{l}^s$, μ le module de cisaillement et ρ^s la densité de dislocation se déplaçant sur le système s. Ainsi, l'écrouissage peut-il être traduit dans les modèles par des densités de dislocation. L'évolution de la plasticité est enrichie par une nouvelle équation différentielle sur l'évolution de la quantité de dislocations. Pour le modèle ci-dessus, les auteurs utilisent une loi d'évolution non linéaire :

$$\dot{\rho}^s = \frac{1}{b} \left[\frac{\sqrt{\sum \alpha_{sj} \rho^j}}{K} - 2 d^s \rho^s \right] \dot{\gamma}^s \tag{1.23}$$

L'expression introduit un certain équilibre « physique » observé entre le taux d'accumulation des dislocations sur le système s (avec des interactions entre systèmes) et leur annihilation possible, uniquement sur le système s.

Une autre formulation de l'écoulement plastique découle de l'équation d'**Orowan** :

$$\dot{\gamma}^s = \rho_M^s b V^s \tag{1.24}$$

où ρ_M^s représente la densité de dislocations mobiles et V^s la vitesse moyenne de glissement des dislocations. C'est le cas du modèle de **Ma** et **Roters**, la vitesse de glissement est exprimée sous une forme « thermiquement activée » qui ressemble à celle utilisée en 1.21 et introduit un sinus hyperbolique [Ma and Roters, 2004] :

$$V^s = \lambda^s v_0 \exp\left(-\frac{Q_{slip}}{K_B \theta} \right) \sinh\left(\frac{|\tau^s| - r^s}{K_B \theta} B^s \right) \tag{1.25}$$

où λ^s représente une largeur de saut de la dislocation, Q_{slip} l'énergie d'activation pour le glissement et r^s représente les forces motrices externes (au sens d'un écrouissage isotrope). En effet, nous avions vu dans la partie précédente que ces dislocations mobiles interagissent avec celles qui sont immobiles. Cela est traduit par la matrice d'écrouissage latent pour les modèles à variables phénoménologiques. Ici, les auteurs proposent de définir différentes densités de dislocations : mobiles, immobiles, parallèles ou normales pour chaque système de glissement. Ces deux dernières sont définies à partir des dislocations immobiles des systèmes r suivant :

$$\begin{cases} \rho_N^s &= \sum_r \rho_I^r |cos(\vec{n}^s, \vec{n}^r \times \vec{l}^r)| \\ \rho_P^s &= \sum_r \rho_I^r |sin(\vec{n}^s, \vec{n}^r \times \vec{l}^r)| \end{cases} \tag{1.26}$$

La variable d'écrouissage isotrope (redevenue additive dans le modèle) est définie selon :

$$r^s = c_1 G b \sqrt{\rho_P^s + \rho_N^s} \tag{1.27}$$

Dans cette expression, « l'obstacle » formé par les dislocations immobiles gêne, sans distinction sur son type (normale ou parallèle), la dislocation mobile. De plus, deux paramètres sont introduits dans :

$$\begin{cases} \lambda^s &= \dfrac{c_2}{\sqrt{\rho_N^s}} \\ B^s &= c_3 b^2 \lambda^s \end{cases} \tag{1.28}$$

Une loi d'évolution non linéaire sur chacune des quatre densités de dislocations est exprimée dans le modèle.

Le choix de la thèse

Délimiter l'échelle locale consiste à choisir celle en dessous de laquelle nous acceptons que les hétérogénéités soient prises en compte comme des variables internes dans l'approche des milieux continus plutôt que d'être représentées de façon explicite. Si on s'intéresse au comportement d'un « monograin » DS200+Hf, nous avons vu dans une première partie que le matériau est hétérogène. A l'échelle d'une centaine de micromètres, nous pouvons discerner une zone dendritique et inter-dendritique avec des concentrations en carbures et précipités γ' différentes induites par une ségrégation chimique. Cette différence est en partie annihilée par les traitements thermiques postérieurs et donc le comportement « composite » de cette échelle est très peu étudié. A l'échelle du micromètre, on remarque une structure bi-phasée γ-γ' qui procure au matériau des propriétés mécaniques notables. Des études récentes tentent donc d'introduire cette échelle dans le calcul, soit de manière implicite sous la forme de différents jeux de variables internes [Cormier and Cailletaud, 2010, Le Graverend et al., 2014] ou bien de manière explicite [Ghosh et al., 2016]. A ce stade, trois grandes stratégies peuvent être mentionnées :

1. Approche phénoménologique : le modèle de **Méric-Cailletaud** est utilisé sous sa forme originale.

2. Prise en compte du vieillissement microstructural au moyen de variables internes spécifiques, qui permettent de quantifier l'évolution des hétérogénéités microscopiques en fonction de la température et de représenter l'impact sur le comportement.

3. Approche biphasée : application d'un modèle (par exemple **Ma-Roters** à la matrice austénitique γ et aux précipités γ', puis transition d'échelles afin d'obtenir le comportement homogénéisé d'un grain.

Dans un premier temps, nous avons écarté l'approche avec un vieillissement microstructural, en particulier le modèle Polystar [Cormier and Cailletaud, 2010]. Dans notre application, qui concerne les étages basse pression d'une turbine aéronautique, les hausses brutales de température dues à des procédures d'urgence sont peu importantes. D'autre part, aucun essai thermo-mécanique n'a été mené sur le MarM200 + Hf pour identifier ce type de modèle. Nous considérons que le vieillissement structural a pour unique effet de diminuer l'anisotropie cristallographique.

Pour le modèle de **Ma-Roters**, l'écrouissage est traduit par des mécanismes physiques d'interaction entre dislocations. Aucun durcissement de type hétérogénéité chimique n'est pris en compte. Il est donc nécessaire de se placer à une échelle où les phases pourront être supposées « pures », ce qui est difficile à trouver dans les superalliages à base de nickel. Ce type d'étude a été mené récemment par **Ghosh** [Ghosh et al., 2016] sur des alliages base-nickel polycristallins. Le modèle introduit alors deux « montées d'échelle » : le passage d'une cellule élémentaire γ/γ' à un grain puis le passage d'un grain au comportement polycristallin. Néanmoins, l'évolution de la morphologie des γ' n'est pas prise en compte alors que les températures auxquelles le modèle est utilisé sont favorables à la mise en radeaux. L'aspect prévisionnel du modèle est donc illusoire, puisque la cellule élémentaire n'est plus représentative. D'autre part, cette classe de modèles introduit des valeurs différentes des paramètres pour les phases γ et γ'. Comme il n'y a que très peu de données expérimentales disponibles à cette échelle, le recalage est délicat, d'autant plus que le nombre de paramètres est conséquent. Utiliser un modèle mécanique dit « physique » sans calibrer rigoureusement chaque mécanisme indépendamment enlève une partie du sens « physique » aux prévisions effectuées.

Il est proposé d'utiliser le modèle de Méric-Cailletaud dans la suite avec un calibrage à chaque température. Ce modèle présente par ailleurs l'avantage de conduire à des temps de calcul raisonnables, ce qui le rend pleinement opérationnel pour des simulations de pièces industrielles.

1.3 Identification des paramètres pour le MarM200 + Hf

Les paramètres du modèle de **Méric Cailletaud** sont identifiés en grande partie sur la base des essais mécaniques figurant dans la thèse de **Mataveli-Suave**. Le lecteur pourra s'y référer pour toutes les questions sur les conditions opératoires et les observations microstructurales [Mataveli Suave, 2017]. En particulier dans la thèse, une version monocristalline du DS200+Hf a été développée, avec la même composition chimique. Cet alliage est appelé MarM200+Hf dans la suite car contrairement au MarM200 classique, il possède de l'Hafnium (qui n'est pas présent dans les autres alliages monocristallins). Deux températures cibles ont été définies par le groupe Safran, $650\,^{\circ}\mathrm{C}$ et $900\,^{\circ}\mathrm{C}$. Néanmoins, nous proposerons en annexe des paramètres aux températures intermédiaires en se basant sur les résultats du modèle actuellement utilisé par Safran Aircraft Engines qui sera décrit dans le chapitre 2 et dans l'annexe 2. Ce modèle avait préalablement été identifié sur des éprouvettes en DS200+Hf sollicitées dans la direction longitudinale pour des températures allant de $20\,^{\circ}\mathrm{C}$ à $1100\,^{\circ}\mathrm{C}$. Nous tâcherons de conserver une cohérence dans l'évolution des paramètres matériau avec la température afin d'être en mesure de réaliser des calculs anisothermes. En particulier, nous vérifierons que les paramètres évoluent de la même manière que pour le modèle macroscopique utilisé par Safran Aircraft Engines. Les équations du modèle local retenu sont :

$$\left\{\begin{array}{rcl} \dot{\gamma}^s & = & \dot{\gamma}_r^s + \dot{\gamma}_l^s \\ \dot{\gamma}_r^s & = & \left\langle \dfrac{|\tau^s - x^s| - \tau_c}{K_r} \right\rangle^{n_r} \mathrm{sign}(\tau^s - x^s) \\ x^s & = & c_1\alpha^s + c_2\gamma_r^s\eta_r^s \text{ avec } \dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}_r^s - d\dot{v}^s\alpha^s \\ \dot{\gamma}_l^s & = & \left\langle \dfrac{|\tau^s|}{K_l} \right\rangle^{n_l} \mathrm{sign}(\tau^s) \end{array}\right. \tag{1.29}$$

Nous avons conservé l'approche à deux potentiels permettant d'améliorer les prédictions dans les deux régimes asymptotiques de chargement, lent (désigné par l'indice l et servant essentiellement pour le fluage secondaire) et rapide (désigné par l'indice r et utilisé pour la traction/compression), lorsque cela est nécessaire. D'autre part, le modèle conserve un formalisme proche de celui utilisé par Safran Aircraft Engines (les équations sont détaillées dans la partie 2.2). Des relations d'équivalence peuvent même être trouvées pour des bareaux monocristallins avec des orientations particulières vis-à-vis du chargement ($e.g.$ une traction uniaxiale selon une direction cristallographique <001>) pour recaler la plupart des paramètres (voir l'annexe 2). Nous nous servirons de ces équivalences comme point initial de l'identification et par la suite, nous affinerons ceux-ci avec de nouvelles données expérimentales. A noter qu'il est préférable de conserver le paramètre d (effet **Bauschinger**) constant à toutes les températures afin de prévenir des valeurs « absurdes » du domaine d'élasticité lors de fortes variations de la température [Cailletaud et al., 2015]. Comme mentionné par les auteurs, la non linéarité de la courbe de traction est différente à faible température et à haute température pour les superalliages à base de nickel, ce qui conduit classiquement à faire varier plus ou moins brutalement ce paramètre d. Cette variation doit être prise en compte par la présence de plusieurs variables

cinématiques (avec chacune un d constant en fonction de la température) dont on pondère la contribution en fonction de la température. Pour ce qui nous concerne, nous avons ajouté un écrouissage linéaire, actif uniquement à basse température, pour améliorer les prédictions du modèle en évitant de saturer trop tôt la contrainte axiale.

1.3.1 Paramètres matériau du MarM200+Hf à $650\,°C$

La microstructure spécifique des alliages DS nous permet d'utiliser les essais longitudinaux (SL) pour identifier le comportement monotone du monocristal, en faisant l'hypothèse que la désorientation primaire des grains ne génère pas de dispersion dans les résultats. A cette température, l'identification du modèle est réalisée par rapport aux essais expérimentaux disponibles. Elle se traduit par :

1. l'utilisation des 3 composantes du tenseur d'élasticité cubique obtenues par méthode résonnante pour le CMSX4 monogranulaire ;
2. la recherche d'une limite d'élasticité obtenue en traction monotone par des essais $in\ situ$ sous MEB ;
3. le calage des paramètres restants sur la base des essais uniaxiaux réalisés par **Mataveli-Suave**.

On ne cherche pas un effet particulier du potentiel lent aux basses températures (jusqu'à $650\,°C$) car l'impact de la vitesse de chargement est négligeable.

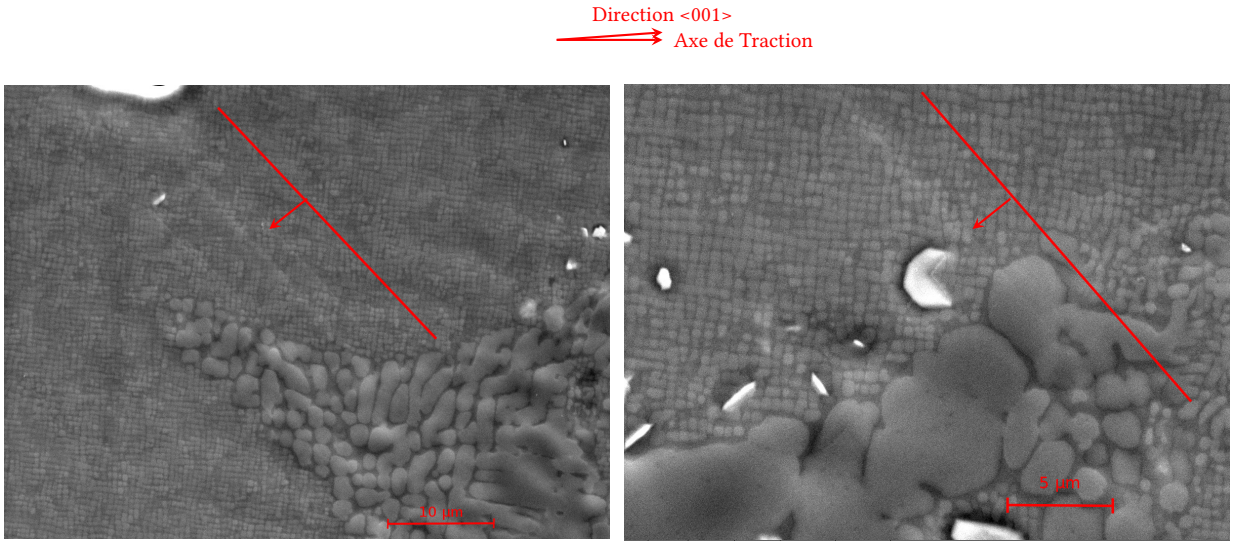
Il a été vérifié lors des essais par méthode résonnante que le comportement élastique du matériau MarM200+Hf est similaire à celui du CMSX4, pour lequel une étude plus étendue a permis de définir les 3 composantes indépendantes du tenseur d'élasticité [Giraud, 2014]. Nous illustrerons ce propos dans le chapitre 2. Il a été décidé, en concertation avec Safran, d'utiliser ces valeurs dans toute la gamme de température [20-960 °C]. Une extrapolation des valeurs pour chaque composante avait également été proposée pour le CMSX4 jusqu'à $1200\,°C$. Nous l'utiliserons pour proposer un jeu de paramètres aux températures supérieures à $960\,°C$.

Traction monotone à température ambiante avec observation *in situ* sous MEB

L'analyse des résultats de traction n'est pas suffisante pour extraire avec précision une limite d'élasticité. C'est ce qui explique que l'ingénieur utilise classiquement comme seuil la valeur de la contrainte générant $0{,}2\,\%$ de déformation irréversible, qui est plus facile à obtenir sur les courbes. Dans cette thèse, nous proposons de réaliser un essai de traction avec des observations *in situ* sous MEB à intervalles réguliers. Nous recherchons les premières bandes de glissement, signe de l'apparition de la déformation plastique. Pour cela, une éprouvette plate a été usinée dans un barreau monogranulaire MarM200+Hf, avec une direction de chargement proche d'un axe cristallographique <001>. Les deux surfaces de l'éprouvette sont polies électrolytiquement pendant $8\,s$ dans une solution A3 de Struers à $4\,°C$ sous $45\,V$.

L'essai a été mené à température ambiante avec un grand nombre de points d'observation : $0\,MPa$, $500\,MPa$, $600\,MPa$, $650\,MPa$, $700\,MPa$, $720\,MPa$, $740\,MPa$, $760\,MPa$, $800\,MPa$, $830\,MPa$, $860\,MPa$, $870\,MPa$. A chaque fois, plusieurs zones ont été balayées, à différentes échelles (des fenêtres de $1\,mm$ à $50\,\mu m$). Bien entendu, notre ambition n'est pas de trouver la toute première bande de glissement, mais plutôt de déterminer le démarrage réel de la plasticité. Sur l'éprouvette observée, ce début de l'activité plastique se situe entre 800 et 830 MPa

puisque des bandes de glissement sont apparues dans cet intervalle (voir la figure 1.9). Si la surface de l'échantillon avait été usinée de manière à avoir une normale confondue avec une direction cristallographique <100> (avec un axe de traction également <001>), la seule trace d'un glissement sur un système octaédrique formerait un angle de $45°$ avec le plan d'observation. Sur la figure 1.9, les traces observables font un angle de $47°$. La différence provient sûrement d'une désorientation entre les axes cristallographiques du matériau et les axes de traction et d'observation. D'autre part, notre recherche n'a pas permis de conclure sur une localisation préférentielle des bandes de glissement proches d'une phase « dure » de type carbures (précipités blancs sur les images) ou de zones eutectiques γ/γ'. Néanmoins, à plus fort grossissement, on observe une activité plastique à proximité de ces phases comme le montre la figure 1.9.

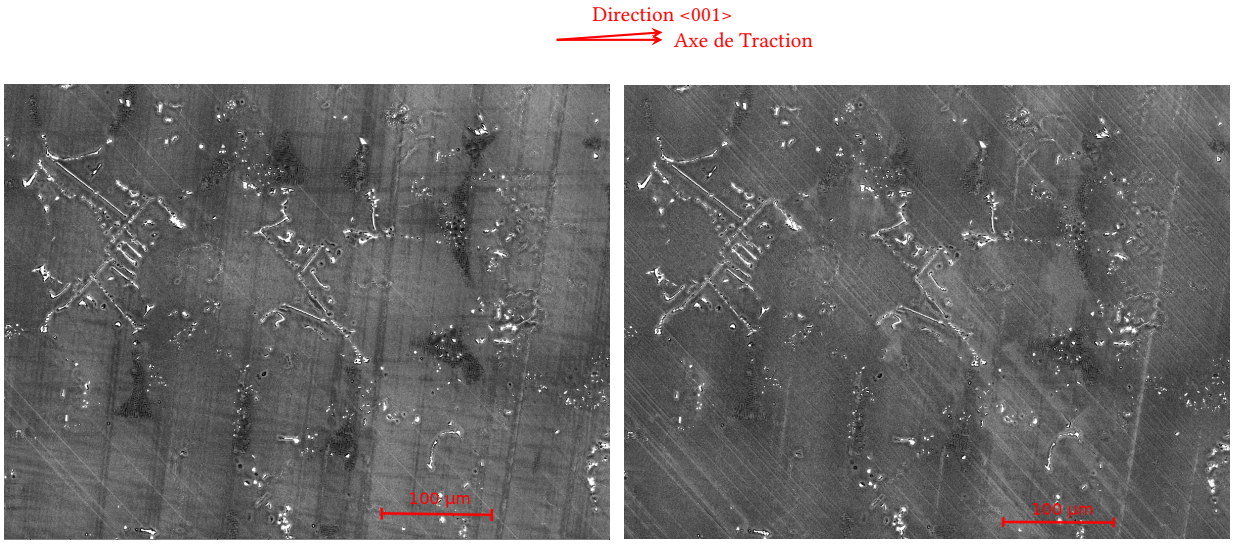


$\Sigma = 830$ MPa $\Sigma = 830$ MPa

Figure 1.9 – *Images prises avec le détecteur d'électrons secondaires durant un essai de traction monotone $in\ situ$ sous MEB à $\times 2000$ (gauche) et $\times 4000$ (droite) sur un monograin de MarM200 et d'orientation proche de <001>, pour une contrainte appliquée de* $830\,\mathrm{MPa}$.

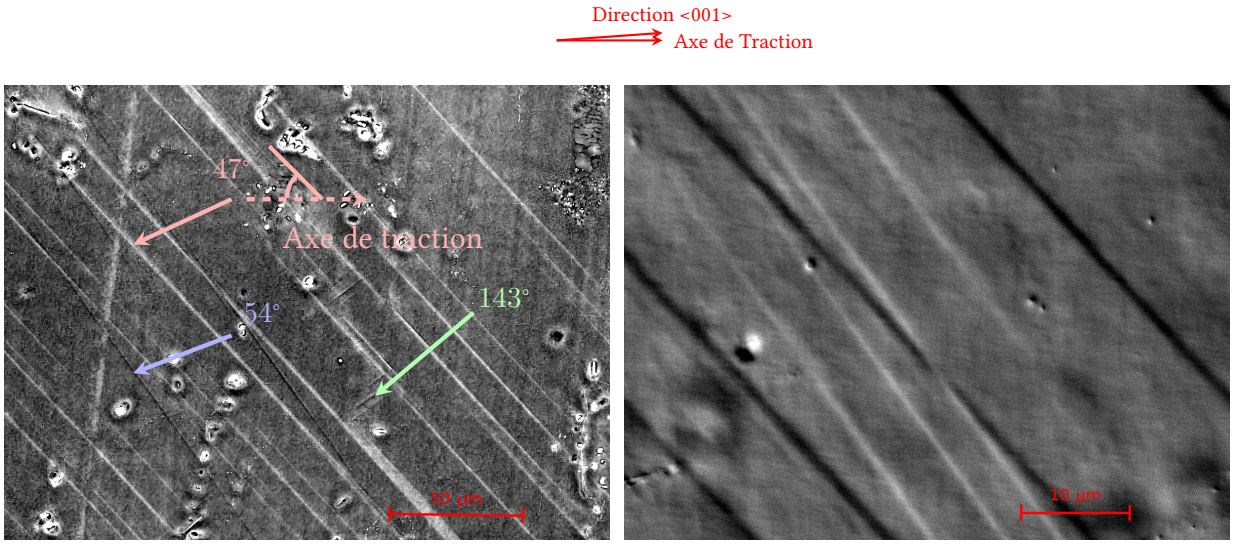
Nous observons une évolution exponentielle du nombre de bandes de glissement lorsqu'on augmente la contrainte appliquée de $30\,\mathrm{MPa}$ puis de $10\,\mathrm{MPa}$ (voir la figure 1.10). Cette observation est à rapprocher du faible écrouissage que présentent les courbes de traction dans le domaine plastique : une augmentation faible de la contrainte entraîne une augmentation forte de la déformation inélastique.

Cet essai illustre bien l'importance du seuil de plasticité qui symbolise en quelque sorte la contrainte suffisante à fournir aux dislocations pour cisailler les précipités. Si elle n'est pas suffisante, aucune bande de glissement n'est observée et à l'inverse, si la contrainte dépasse le seuil, une augmentation très rapide du nombre de bandes de glissement est observée. D'autre part, pour une contrainte de $870\,\mathrm{MPa}$, on remarque l'apparition d'autres systèmes de glissement (Fig 1.11). Nous distinguons trois traces différentes susceptibles de provenir d'un glissement du réseau cristallin et qui font avec l'axe de traction des angles de $47°$, $54°$ et $143°$.



$\Sigma = 860$ MPa $\Sigma = 870$ MPa

Figure 1.10 – *Images prises avec le détecteur d'électrons rétrodiffusés durant un essai de traction monotone in situ sous MEB à ×200 sur un monograin de MarM200 et d'orientation proche de <001>, pour une contrainte appliquée de* 860 MPa *(gauche) et* 870 MPa *(droite).*



$\Sigma = 870$ MPa $\Sigma = 870$ MPa

Figure 1.11 – *Images prises durant un essai de traction monotone in situ sous MEB à ×500 (droite) et ×2000 (gauche) sur un monograin de MarM200 et d'orientation proche de <001>, pour une contrainte appliquée de* 870 MPa.

L'image prise avec un grossissement de 500 (Fig 1.11) ne permet pas de connaître la direction du relief générée par la trace de glissement sur la surface (déformation hors plan). Une image « topographique » des deux bandes de glissements ($47°$ et $54°$) a été réalisée dans ce but (voir l'image 1.11 gauche). Elle consiste à soustraire les signaux obtenus par 2 capteurs en électrons rétrodiffusés aux deux autres sachant que 4 sont disponibles au total. En pratique, cela permet « d'éclairer avec une lumière non perpendiculaire » la zone, l'orientation dépendant directement des deux paires de capteurs choisies. Une bande blanche signifie que le relief possède une normale avec une direction similaire à l'orientation de la lumière. Inversement, une bande noire est observée lorsque le relief « est caché ».

Essais uniaxiaux de traction monotone et cyclique

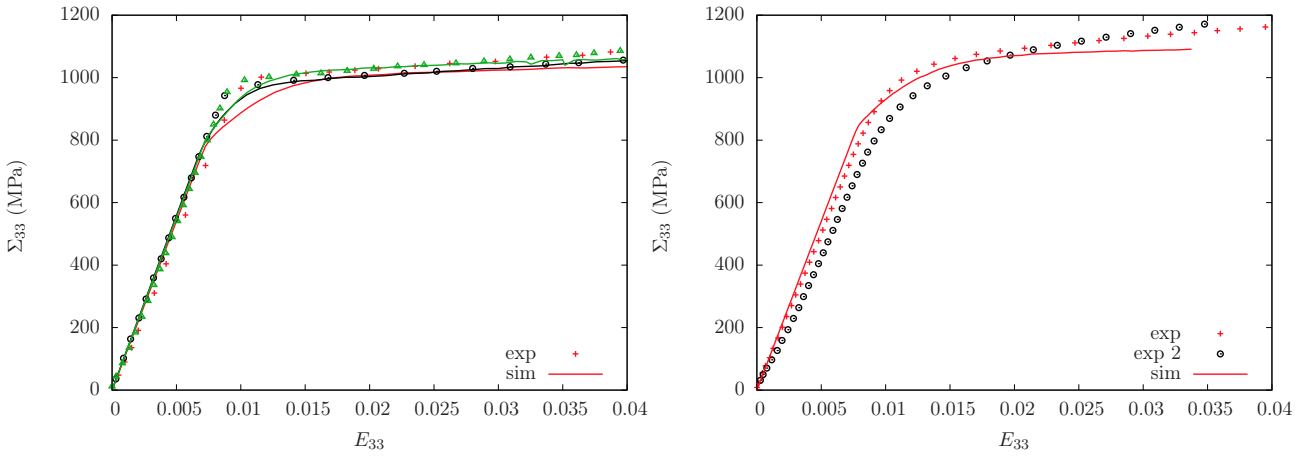
La partie précédente nous a permis d'évaluer une limite d'élasticité « vraie ». Nous avons décelé une valeur proche de $830\,\mathrm{MPa}$ avec l'essai $in\ situ$ précédent. Nous ajusterons la cission résolue critique de manière à obtenir une limite d'élasticité semblable dans nos simulations des essais de traction. De plus, les essais réalisés par **Mataveli-Suave** pour deux vitesses de déformation de $1 \times 10^{-3}\,\mathrm{s}^{-1}$ et $1 \times 10^{-5}\,\mathrm{s}^{-1}$ à $650\,°\mathrm{C}$ montrent un faible écart sur la contrainte maximale. Nous avons évalué cet écart sur la contrainte à $50\,\mathrm{MPa}$. En supposant que l'orientation cristallographique du matériau par rapport à l'axe de chargement est identique, la seule différence provient de la contribution visqueuse de la contrainte qui dépend de la vitesse de sollicitations (les contributions de l'écrouissage et de la cission résolue critique sont égales). En régime stabilisé dans le domaine plastique (par exemple pour une déformation totale de $4\,\%$), cette différence peut s'estimer par :

$$\Delta\Sigma = \sqrt{6}K_r \left[\left(\frac{\sqrt{6}}{8}10^{-3}\right)^{1/n_r} - \left(\frac{\sqrt{6}}{8}10^{-5}\right)^{1/n_r} \right] \tag{1.30}$$

Nous décidons de fixer n_r à 20 pour traduire la faible dépendance à la vitesse de chargement. Alors une valeur est obtenue pour K_r, égale à $180\,\mathrm{MPa.s}^{1/n_r}$. Nous évaluons la cission résolue critique à $235\,\mathrm{MPa}$ pour atteindre la limite d'élasticité observée $in\ situ$ sous MEB. Il faut également s'assurer que le paramètre K_r est suffisamment grand pour éviter une valeur de glissement trop importante (le numérateur doit rester plus faible que K_r sous la puissance dans le jeu d'équations 1.29). La figure 1.12 compare les réponses du modèle local avec les essais expérimentaux de traction uniaxiale sur du MarM200+Hf et du DS200 sollicité dans la direction de solidification.

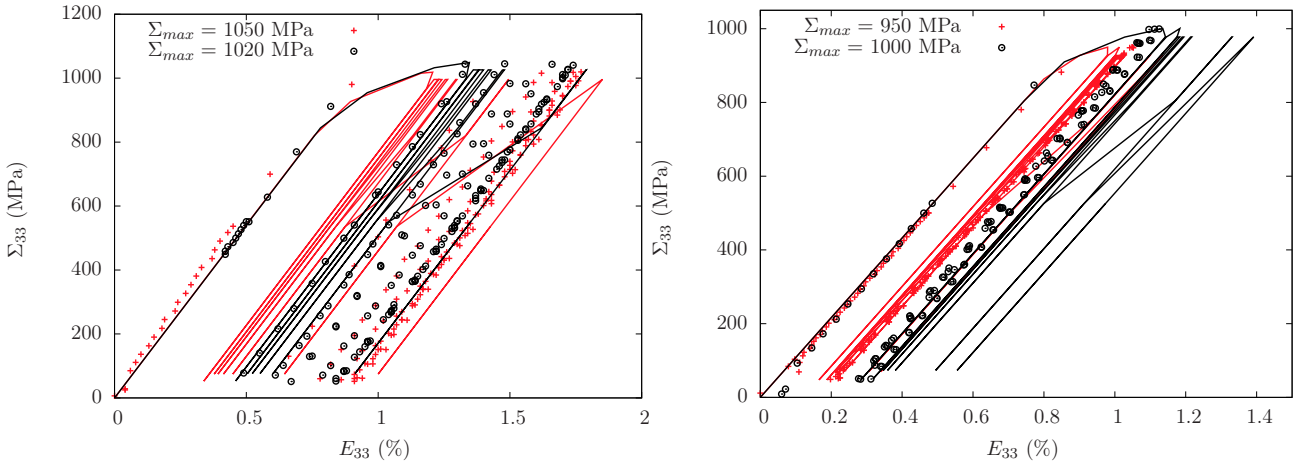
Les deux paramètres c_1 et c_2 de l'équation 1.29 sont recalés à partir des courbes de traction issues de [Mataveli Suave, 2017]. Pour traduire le module apparent d'écrouissage en régime stabilisé (lorsque E^p atteint $0,02$), le paramètre d'écrouissage linéaire est identifié principalement sur les essais « monograins » car tous les essais semblent cohérents. Le module observé pour le DS200+Hf en sens long est plus élevé que pour la simulation, qui conserve la valeur du monograin. Ceci peut être expliqué par la désorientation primaire des grains (nous reviendrons sur ce défaut à la fin du chapitre 3). Toutefois, la figure 1.13 montre une bonne corrélation entre les modules apparents élastiques simulé et expérimental pour le DS200 en sens long. Cela nous conforte dans l'identification des composantes du tenseur d'élasticité utilisée. La figure 1.13 donne les résultats de traction cyclique pour un ratio R_σ=0,05 jusqu'à 10 000 cycles.

Les boucles restent fermées à la décharge, ce qui signifie qu'il n'y aura pas de phénomène de rochet. L'accumulation de déformation plastique est générée par la viscosité du matériau :



Barreaux monogranulaires MarM200+Hf — DS200 sollicité en sens long

Figure 1.12 – *Confrontation du modèle local avec les essais de traction uniaxiale réalisés par* **Mataveli-Suave** *à* 650 °C *[Mataveli Suave, 2017].*



Barreaux monogranulaires MarM200+Hf — DS200 sollicité en sens long

Figure 1.13 – *Confrontation jusqu'à 10 000 cycles du modèle local avec les essais de fatigue réalisés par* **Mataveli-Suave** *à* 650 °C *[Mataveli Suave, 2017]. Le signal imposé sur la contrainte est sinusoïdal avec une amplitude de* $(1 - 0,05)\Sigma_{max}$.

nous parlons plutôt de fluage cyclique. Finalement, les paramètres matériau du modèle local à $650\,°\mathrm{C}$ sont rassemblés dans le tableau 1.4.

c_1 [MPa]	c_2 [MPa]	d	C_{1111} [MPa]	C_{1122} [MPa]	C_{1212} [MPa]
85 000	1 200	1 100	203 760	125 490	112 000
K_r [MPa s$^{1/n_r}$]	n_r	K_l [MPa s$^{1/n_l}$]	n_l	τ_c [MPa]	
180	20	1 000	30	235	

Table 1.4 – *Résultat de l'identification des paramètres du modèle local pour le DS200 à* $650\,°\mathrm{C}$.

Les deux paramètres du potentiel lent sont fixés en utilisant les relations d'équivalence avec le modèle macroscopique de Safran.

1.3.2 Paramètres matériau traduisant le comportement d'un monograin de DS200 à $900\,°\mathrm{C}$

A haute température, la dépendance du comportement mécanique à la vitesse de chargement devient importante. En particulier, le potentiel lent est utilisé pour prédire le comportement en fluage secondaire alors que le second potentiel est recalé sur différentes vitesses de déformation en traction simple. Comme pour les basses températures, il ne semble pas y avoir de durcissement cyclique pour des chargements proportionnels en déformation uniaxiale. L'identification à haute température sera décomposée en deux étapes :

1. Evaluation des différentes dépendances à la vitesse de chargement (traction et fluage secondaire) ;

2. Recalage des variables d'écrouissage cinématique.

Evaluation de la composante visqueuse à $900\,°\mathrm{C}$

La quantification des paramètres de la loi puissance a classiquement pour point de départ le graphe en $log(\Sigma_\infty) = f(log(\dot{E}))$, où :

- sur une courbe de traction simple, Σ_∞ représente la contrainte maximale atteinte et $\dot{E}$ la vitesse de déformation (plastique) macroscopique [Besson et al., 2001].

- sur une courbe de fluage, Σ_∞ représente la contrainte appliquée et $\dot{E}$ le coefficient directeur de la droite représentant le fluage secondaire dans un graphe $E = f(t)$.

Pour le modèle de plasticité cristalline, considérant une sollicitation uniaxiale de traction, le chargement est situé sur un point singulier de la surface de charge où 8 systèmes de glissements octaédriques sont activés. On peut simplifier l'expression de la déformation plastique en 1.7 selon :

$$\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{vp} = 8\frac{1}{\sqrt{6}}\dot{\gamma} \tag{1.31}$$

où $\dot{\gamma}$ est la vitesse de glissement commune aux 8 systèmes. En l'absence d'écrouissage isotrope, celle-ci s'écrit :

$$\begin{cases} \dot{\gamma} &= \left[\dfrac{\Sigma_\infty \frac{1}{\sqrt{6}} - x^s - \tau_c}{K}\right]^n \\ x^s &= \dfrac{c}{d}(1 - \exp(-d\gamma)) \end{cases} \tag{1.32}$$

En faisant l'hypothèse qu'à la contrainte Σ_∞ le matériau se soit déformé suffisamment plastiquement, on peut négliger le terme exponentiel dans l'expression de x^s. On trouve alors la relation :

$$log(\Sigma_\infty - \sqrt{6}\frac{c}{d} - \sqrt{6}\tau_c) = log(\sqrt{6}K) + \frac{1}{n}log(\frac{\sqrt{6}}{8}\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{vp}) \tag{1.33}$$

La figure 1.14 analyse les données expérimentales de traction et fluage à 900 °C pour un monograin d'orientation <001> et le DS en sens long, avec un graphe utilisant l'expression 1.33.

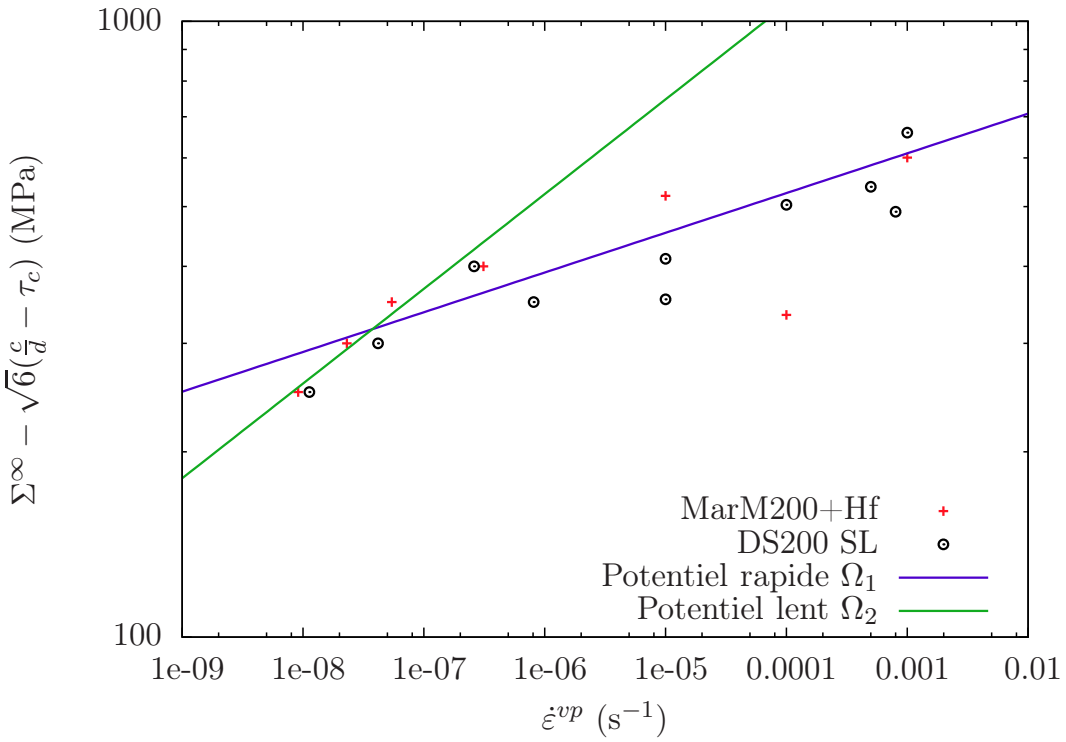


Figure 1.14 – *Graphe permettant de mettre en évidence la fonction puissance reliant une contrainte équivalente à la vitesse de déformation plastique.*

Comme discuté précédemment, une dépendance différente est observée au taux de déformation pour les basses vitesses (fluage) et les hautes vitesses (traction) à 900 °C. Le potentiel lent a donc tout son intérêt. Il est à noter que ce tracé requiert une première évaluation de la cission résolue critique et de l'écrouissage cinématique. Dans un premier temps, nous attribuons à ces paramètres des valeurs en utilisant les relations d'équivalence avec le modèle macroscopique de Safran à cette température. Lorsque ces paramètres seront modifiés en confrontant le modèle aux essais de traction et fatigue, le graphe 1.14 sera à nouveau utilisé pour recaler les paramètres visqueux. Les grandes dispersions observées sont probablement dues aux désorientations cristallographiques par rapport à <001> pour les SX et la différence de composition chimique et traitement thermique entre les essais DS sens long réalisés précédemment par Safran Aircraft Engines et ceux de **Mataveli-Suave**. Finalement, les paramètres matériau

du modèle local à 900 °C sont rassemblés dans le tableau 1.5.

c_1 [MPa]	c_2 [MPa]	d	C_{1111} [MPa]	C_{1122} [MPa]	C_{1212} [MPa]
110 000	0	1 100	190 200	110 770	118 500
K_r [MPa s$^{1/n_r}$]	n_r	K_l [MPa s$^{1/n_l}$]	n_l	τ_c [MPa]	
540	15,5	2100	6	30	

Table 1.5 – *Résultat de l'identification des paramètres du modèle local pour le DS200 à* 900 °C.

Traction uniaxiale monotone à 900 °C

Les essais de traction uniaxiale réalisés par **Mataveli-Suave** sont principalement utilisés pour l'identification du modèle. Toutefois, des données issues de précédentes études réalisées par Safran Aircraft Engines ont également été comparées, en particulier des essais de relaxation. Pour l'écrouissage cinématique, on remarque que la contrainte n'évolue plus après une déformation totale de 1,5 % (Fig. 1.15). Ceci est cohérent avec la valeur du paramètre d fixé, comme le montre la valeur de $\exp(-\frac{\sqrt{6}}{8}dE^p)$ qui ne vaut plus que 0,03 pour une déformation plastique de 1 %. Puisque la contrainte semble atteindre une valeur de saturation, le second écrouissage linéaire n'est plus utile. Enfin, on mesure une contrainte totale induite par l'écrouissage proche de 250 MPa (partie non linéaire des courbes de traction simple). L'expression pour cette contrainte est :

$$\Sigma_H = \sqrt{6}\frac{c1}{d} \tag{1.34}$$

On obtient aisément une estimation de c_1. On peut déduire une valeur de τ_c en regardant les valeurs de Σ_∞. On réalise alors trois itérations pour l'ajustement des paramètres avec le graphe décrit dans la partie précédente. La figure 1.15 montre la corrélation essai/simulation pour trois vitesses de sollicitation à 900 °C.

Nous observons une bonne corrélation sur les deux matériaux testés, un barreau monogranulaire de MarM200+Hf d'orientation <001> et le DS200 sollicité dans la direction de solidification. A cette température, les essais cycliques en R_σ = 0,05 n'ont pas été introduits car l'information fournie est redondante. De fait, les amplitudes de sollicitation sont trop faibles pour avoir des boucles ouvertes. L'accumulation de déformation plastique revient également à un phénomène de fluage cyclique déjà mentionné à 650 °C. Une bonne corrélation a toutefois été observée.

Fluage uniaxial à haute température

Pour le fluage, il n'y a pas besoin de réaliser d'itération pour déterminer les coefficients de la loi puissance car ce potentiel ne comporte ni de seuil ni d'écrouissage. La figure1.16 propose une comparaison avec les essais expérimentaux réalisés par **Mataveli Suave** [Mataveli Suave, 2017].

Nous mentionnons qu'une loi d'endommagement en fluage de type **Rabotnov** et **Katchanov** a été ajoutée pour traduire le fluage tertiaire. Cette loi a été identifiée pour le DS200 dans [Mataveli Suave, 2017]. Par conséquent, nous vérifions que l'identification des deux paramètres proposée n'est pas altérée par l'ajout de cette loi d'endommagement en fluage.

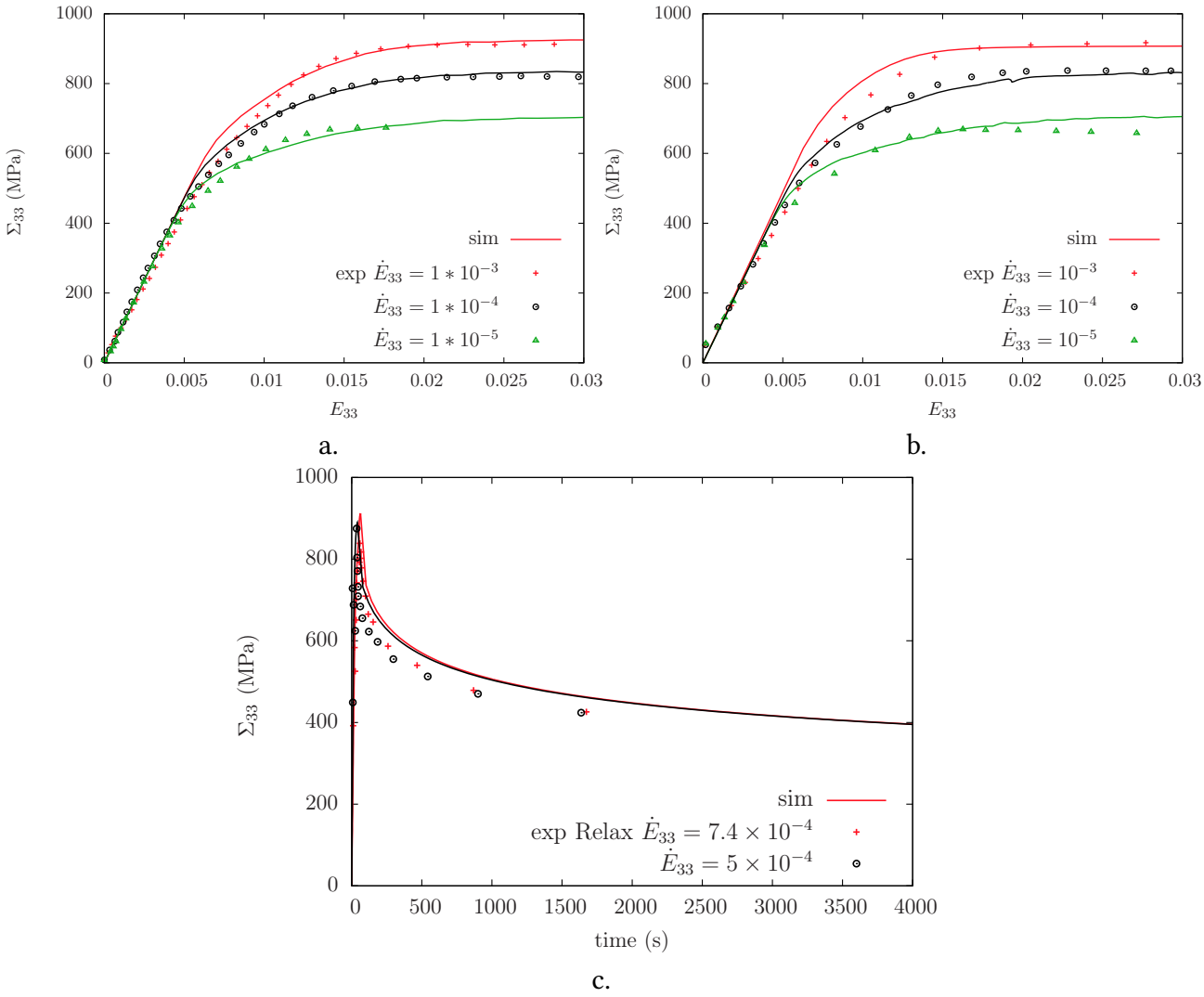
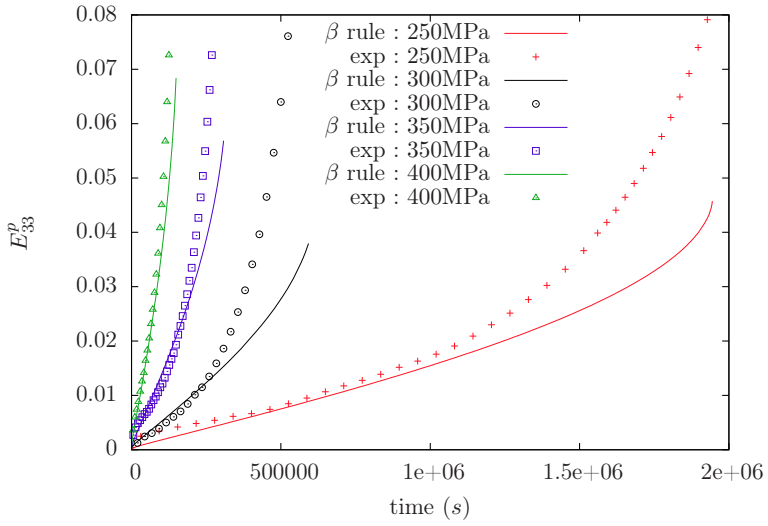
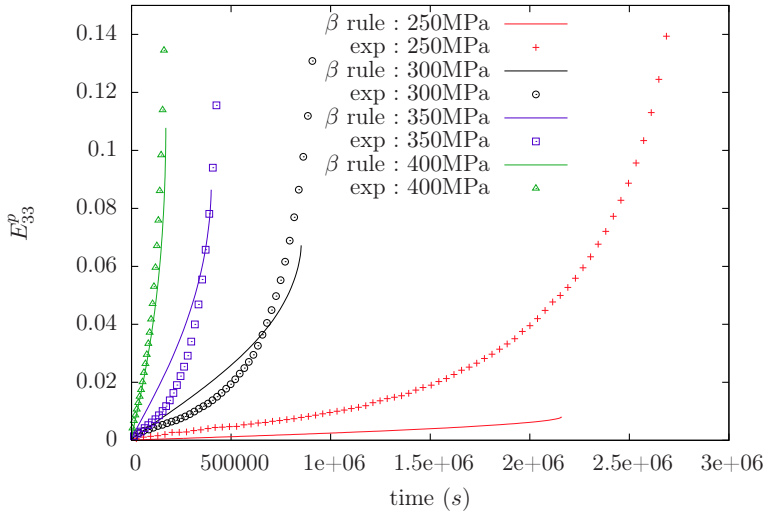


Figure 1.15 – *Comparaisons des réponses du modèle et des essais pour un chargement en traction uniaxiale réalisés par* **Mataveli-Suave** *[Mataveli Suave, 2017] à* 900 °C. *a. : Essais sur DS200 dans la direction longitudinale. b : Essais sur une éprouvette en MarM200+Hf <001>. c : Relaxation après deux tractions uniaxiales sur DS200 réalisées par Safran Aircraft Engines.*



a.



b.

Figure 1.16 – *Comparaisons des réponses du modèle et des essais pour du fluage réalisés par* **Mataveli** *[Mataveli Suave, 2017] à* 900 °*C. a. : Essais sur le DS200 dans la direction longitudinale. b : Essais sur le MarM200+Hf proche <001>.*

CHAPITRE 2

Les niveaux de description d'un agrégat polycristallin

Sommaire

2.1 Simulation d'agrégats en champ complet : construction d'un comportement mécanique de référence 40

2.2 Une modélisation simplifiée du problème polycristallin : l'approche macroscopique 52

2.3 Un niveau intermédiaire dans la représentation d'un agrégat cristallin : l'approche en champ moyen 57

Les avancées de la simulation numérique et des techniques d'observation permettent de réaliser des modélisations du comportement mécanique introduisant la microstructure cristalline réelle ou tout au moins réaliste du matériau. Les premières tentatives de modélisation de polycristaux réels étaient basées sur une observation surfacique permettant de remonter à la texture cristallographique 2D. La suite de l'approche, encore largement utilisée, consiste à plaquer sur l'image un maillage respectant la géométrie des grains et à affecter les orientations correspondantes dans chaque élément en se satisfaisant d'un support 2D ou 2D extrudé pour interpréter des observations de localisation ou rupture locale. Néanmoins, il a été montré que, pour une même surface et en extrapolant plusieurs volumes, on obtient des résultats très dispersés pour les champs mécaniques locaux [Zeghadi et al., 2007b, Zeghadi et al., 2007a]. Comparer les résultats de simulation avec des observations sur la rotation du réseau à proximité des joints de grains ou une localisation préférentielle de l'endommagement est donc une opération risquée. Mais de nos jours, la combinaison de l'imagerie et la diffraction aux rayons X [Ludwig et al., 2009] ou le couplage d'un faisceau d'ions focalisés (FIB) avec un FEGSEM (Field Emission Scanning Electron Microscope) [Xu et al., 2007] permettent d'obtenir la microstructure en trois dimensions. On peut alors évaluer les prévisions des modélisations mécaniques sur de petits échantillons et des « chargements simples ». La richesse des résultats se trouve alors dans les phénomènes locaux : même pour une traction simple, les grains sont sollicités de manière multi-axiale ! Avec le rayonnement synchrotron (analyse non destructive), on peut observer *in situ* des marqueurs de la déformation plastique au cours du chargement. Finalement, l'expérience et la simulation peuvent communiquer à une échelle plus locale du matériau, celle, micrométrique, de l'agrégat cristallin.

Un autre exercice consiste à analyser de façon statistique des modélisations en champ complet sur la réponse mécanique d'agrégats générés artificiellement (e.g. dans [Barbe et al., 2001a, Barbe et al., 2001b]) en menant un ensemble d'« expériences numériques ». Comprendre l'effet d'une rugosité de surface sur la localisation du champ mécanique au sein du polycristal [Guilhem et al., 2013] ou réaliser des analyses statistiques sur l'amorçage de fissures sont des recherches menées actuellement en utilisant des outils tels que la CPFEM (Crystal Plasticity Finite Element Method) [Roters et al., 2010, Cailletaud et al., 2003]. C'est de ce volet dont traite

ce chapitre. Nous allons regarder quelles sont les voies de modélisations pour un agrégat polycristallin, en particulier lorsqu'il présente une forte texture (DS). En effet, le comportement local (au sens de l'approche micromécanique envisagée) a été défini dans le chapitre précédent et il reste à regarder comment réaliser la montée vers l'échelle de l'agrégat. L'utilisation de la CPFEM nous permettra de dégager un comportement mécanique de référence. On comparera différentes représentations de cet agrégat en termes de géométrie des grains et de comportement local choisi. Dans le cadre général de l'homogénéisation, l'hypothèse de séparabilité des échelles impose que la taille de ce Volume Elémentaire Représentatif (VER) soit très petite vis-à-vis de l'éprouvette ou de la structure étudiée. Si cette hypothèse est vérifiée, on cherchera une loi homogène équivalente permettant de traduire fidèlement le comportement de l'agrégat polycristallin pour une gamme de chargement la plus large possible afin de permettre ensuite un calcul à l'échelle d'une structure. Un premier choix consiste à construire un modèle à l'échelle macroscopique où la plasticité est définie par le biais de variables internes phénoménologiques dont l'évolution est à définir en attribuant une valeur aux différents paramètres matériau. Si nous faisons suffisamment confiance aux calculs en champ complet réalisés, ils peuvent alors servir à l'identification des paramètres de la loi homogène, sur des chargements difficiles à réaliser expérimentalement (e.g. le "laboratoire virtuel" DAMASK proposé dans [Zhang et al., 2016]). D'autres modèles « dégénérés » face au calcul CPFE seront considérés dans une troisième partie, ayant comme principal atout de conserver les lois de comportement régissant le comportement local. De telles approches définissent des ponts permettant de localiser les quantités macroscopiques imposées en entrée du modèle puis d'homogénéiser le comportement des grains. Nous qualifierons ce type de modélisation « à champ moyen ».

2.1 Simulation d'agrégats en champ complet : construction d'un comportement mécanique de référence

Afin d'évaluer la pertinence des modèles mécaniques développés par la suite, il est nécessaire de débuter l'étude par la construction d'une référence. Tous nos calculs font appel à la plasticité cristalline (avec la loi de comportement détaillée dans le chapitre précédent) et sont résolus par la méthode des éléments finis (FEM). Il est important de mentionner qu'une alternative à la FEM s'est développée avec le recours à la transformée de Fourier rapide (FFT, Fast Fourier Transform) pour obtenir les propriétés effectives d'un VER [Moulinec and Suquet, 1998]. Cette méthode est d'une part rapide dans la résolution du problème hétérogène et ne nécessite aucun maillage ; le calcul utilise directement les voxels d'une image 3D. Les limites connues sur de forts contrastes entre phases (le cas extrême étant constitué par la présence de pores) [Michel et al., 2001] ou les lois matériau utilisées (e.g. la plasticité cristalline dans [Lebensohn, 2001]) ont été en partie levées durant ces dernières années . Par exemple, une comparaison CPFEM/CPFFT utilisant le modèle de **Méric** et **Cailletaud** a été réalisée sur des polycristaux dans [Robert and Mareau, 2015].

Une première définition générale du VER consiste à dire qu'il s'agit d'un volume suffisamment grand pour que la variable physique étudiée, moyennée sur tout le volume, ne fluctue plus en augmentant la taille du dit volume. Toutefois, il est facile d'imaginer que ce VER n'aura pas exactement la même taille en fonction d'une recherche portée sur le module apparent élastique en traction, en cisaillement, ou bien un seuil de plasticité conventionnel. Il se peut même qu'il y ait des problèmes où la définition d'un VER soit impossible. Dès lors qu'il y a des singularités d'une taille suffisante par rapport à la structure étudiée, la non séparabilité des échelles nous empêche de définir un tel volume. Dans le cas où celui-ci existe, sa recherche pour une

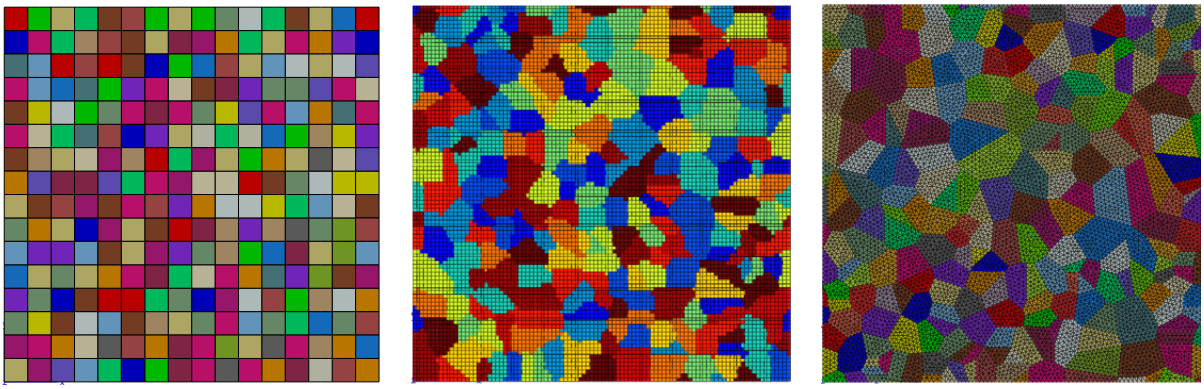
variable macroscopique choisie consiste donc à augmenter de plus en plus la taille du volume calculé jusqu'à réduire les fluctuations dans un intervalle admissible (à définir également). Pour l'étude des agrégats polycristallins, il est de coutume de fixer la taille (par exemple le nombre de grains) et de faire plusieurs réalisations, cela permet de conserver des temps de calcul raisonnables. Pour chaque réalisation, il faut générer un nouvel agrégat synthétique et puis définir une orientation cristallographique à assigner sur chaque élément. La définition résultante d'un VER revient alors à donner la taille de l'agrégat et le nombre de réalisations à effectuer [Kanit et al., 2003] pour atteindre une variable globale dans un intervalle de confiance donné. D'autres auteurs ont cherché à définir un VER non plus sur un agrégat synthétique mais à partir d'une cartographie tridimensionnelle d'un matériau réel. Dans [Qidwai et al., 2012], les auteur proposent une méthode de sélection des sous-volumes qui assureront d'inclure toutes les informations essentielles à la construction du VER. Enfin, d'autres critères doivent ou devraient être considérés lorsqu'on définit le VER comme l'invariance par rapport aux conditions aux limites, à la densité de maillage ou plus généralement à la procédure numérique mise en place pour les calculs.

D'autre part, le contraste de comportement entre les phases [Jeulin, 2012] va jouer un rôle prépondérant pour choisir sa taille. Cette partie tente donc de définir un VER pour le comportement mécanique du monocristal développé dans la première partie de ce manuscrit. De plus, nous souhaitons étendre cette définition du VER à des variables qui ne sont plus moyennées sur tout le volume. Des outils mathématiques comme la portée intégrale [Lantuéjoul, 1991] permettent d'étendre la notion de représentativité à un champ réponse plutôt qu'une quantité moyennée. On s'intéresse alors à la variance du champ mécanique dans des « boîtes » de plus en plus grandes afin de trouver la taille pour laquelle elle n'évolue plus. Dans ce manuscrit, on déclinera différentes notions de représentativité en cherchant à la caractériser vis-à-vis :

1. des variables macroscopiques ;
2. des quantités évalués « par phase cristallographique » [1]
3. des fluctuations locales autour de la moyenne évaluée « par phase cristallographique ». Cela se traduira essentiellement par le calcul d'une variance du champ mécanique pour une variable et une « phase cristallographique » donnée.

Nous utilisons des conditions aux limites périodiques, qui permettent une convergence plus rapide vers les propriétés mécaniques effectives si la taille de l'agrégat est suffisamment grande [Kanit et al., 2003]. Elles seront donc adoptées dans les calculs. Trois types d'agrégat 2D sont étudiés dans un premier temps, pouvant représenter trois visions de l'alliage DS. Le premier agrégat consiste en une grille carrée de 256 éléments (16×16) représentant chacun un grain d'orientation cristallographique ϕ_1 (cas nommé Grid). Le second agrégat est un pavage de Voronoï constitué de 256 grains et projeté sur une grille. Les phases sont définies au niveau des points de Gauss (cas nommé Voro_GP). Enfin, le troisième agrégat est un pavage de Voronoï constitué de 256 grains avec un maillage conforme vis-à-vis des joints de grains (cas nommé

1. Le terme « phase cristallographique » est bien connu en mécanique des milieux hétérogènes. Toutefois, le mot phase ici ne renvoie pas à une phase existante dans le matériau (γ/γ', ...). Il fait référence à un sous-domaine du matériau contenant tous les grains ayant les mêmes propriétés cristallographiques. En général, une phase cristallographique est définie par une orientation cristallographie (par exemple trois angles d'**Euler** ϕ_1,Φ et ϕ_2) et une morphologie représentative des grains (une sphère pour un polycristal non texturé, un cylindre pour les alliages à solidification dirigée, ...) ;



256 éléments C2D8
Grid

10 000 éléments C2D8
Voro-GP

18 090 éléments C2D6
Voro-N

Figure 2.1 – *Trois types d'agrégat 2D étudiés comportant 256 grains*

Voro_N). Cela signifie que, dans ce cas, le contour des joints de grains est défini explicitement par des noeuds. Les 2 dernières surfaces ont été obtenues en utilisant le module $vpoly3d$ déjà utilisé par **Osipov** [Mounoury, 2002, Osipov et al., 2006, Osipov et al., 2008] et présent dans le code éléments finis Z-set [Z-set 8.6, 2016]. La question à laquelle nous souhaitons répondre est la suivante : quelle différence y a-t-il entre ces calculs en termes de propriétés effectives, par phase ou pour ce qui concerne les fluctuations des champs ? Nous modélisons un cas DS « parfait » pour lequel l'axe cristallographique commun à tous les grains est perpendiculaire au plan du maillage. Un seul angle d'**Euler** est donc nécessaire pour décrire la texture. Nous avons choisi de discrétiser l'ensemble des valeurs de $\phi_1 \in [0°, 90°[$ en 30 possibilités $i.e.$ modulo 3°. Un algorithme permet de distribuer aléatoirement ces orientations dans l'agrégat, formant un jeu d'orientations cristallographiques. De plus, les calculs sont menés sur une seule géométrie de VER et donc pour chaque réalisation, seul le jeu des orientations change.

2.1.1 Obtention des propriétés effectives du polycristal

Dans la suite, nous utiliserons les paramètres matériau du DS200 à $650\,°\mathrm{C}$ (voir le chapitre précédent).

Propriétés élastiques effectives

Une seule composante du tenseur des déformations est prise non nulle afin d'obtenir directement :

- $E_{11} \neq 0 : C_{1111} = \dfrac{\Sigma_{11}}{E_{11}}$ et $C_{1122} = \dfrac{\Sigma_{22}}{E_{11}}$
- $E_{22} \neq 0 : C_{2222} = \dfrac{\Sigma_{22}}{E_{22}}$ et $C_{2211} = \dfrac{\Sigma_{11}}{E_{22}}$
- $E_{12} \neq 0 : C_{1212} = \dfrac{\Sigma_{12}}{E_{12}}$

En 2D, des conditions aux limites périodiques sont appliquées sur le contour de la cellule introduisant des relations affines sur le déplacement ; celles-ci lient deux à deux les nœuds des faces

opposés. La déformation hors plan est également maintenue constante et nulle pour chaque réalisation (option *plane_strain*). Un léger biais pourrait alors exister puisque l'on impose à la surface de rester plane au lieu d'une déformation moyenne nulle. Nous verrons par la suite qu'un tel défaut est négligeable en raison du fait que tous les grains partagent la même direction $\vec{x}_3$ et travaillent « en parallèle » dans celle-ci. Les résultats pour une traction transverse selon $\vec{x_1}$ pour les trois maillages sont présentés en figure 2.2. On remarque sur ce champ que la forme du maillage influence la fluctuation locale du champ des contraintes, en particulier pour le cas Grid. Afin de juger de la précision sur les composantes du tenseur d'élasticité effectif,

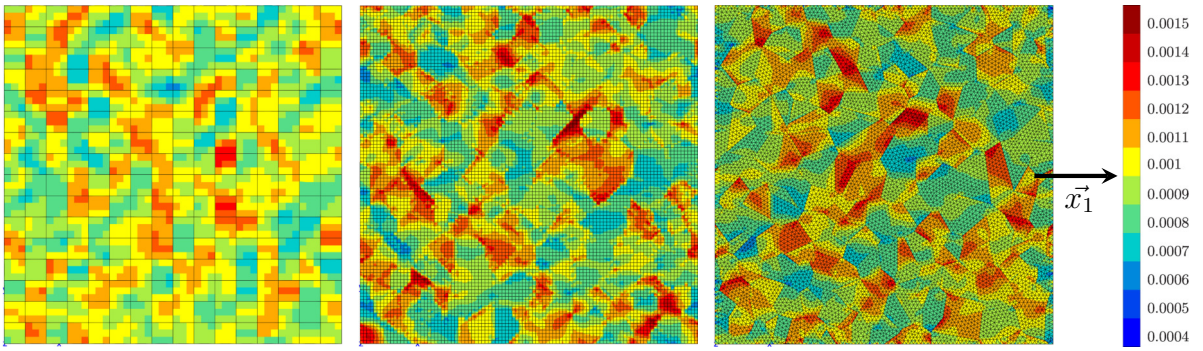


Figure 2.2 – *Carte du champ de déformation ε_{11} pour une valeur à l'infini $E_{11} = 0.001$ pour un jeu d'orientations aléatoires sur les 3 agrégats.*

plusieurs tirages sont entrepris pour chaque agrégat. Un post-traitement permet d'acquérir les composantes du tenseur d'élasticité effectif faisant intervenir la direction transverse en fonction du nombre de réalisations effectuées (voir figure 2.3.a,b,c). On constate que les valeurs des composantes du tenseur d'élasticité effectif convergent lorsqu'une quarantaine de réalisations sont effectuées. Curieusement, on ne peut pas affirmer qu'il y ait une convergence plus lente pour le cas Grid alors que le problème semble très simplifié. L'isotropie transverse du matériau est vérifiée avec une erreur inférieure à 0.1% en comparant les composantes dans les directions $\vec{x}_1$ et $\vec{x}_2$. Enfin, chaque type de géométrie converge tout de même vers des propriétés élastiques effectives différentes. Cela devient non négligeable pour la composante de cisaillement où la différence entre le cas Grid et Voro-N est proche de 1%. Nous constatons un ordre dans les valeurs obtenues en fonction du type d'agrégat choisi. En effet, le cas Grid semble surestimer la contrainte macroscopique élastique, ce qui conduit à une valeur plus grande pour C_{1111} et plus faible de C_{1122} par rapport aux autres maillages. Ceci est également vérifié pour la contrainte en cisaillement, ce qui se retrouve dans la valeur obtenue pour C_{1212}. Les valeurs obtenues à l'aide de calculs sur le maillage Voro-N sont intermédiaires par rapport aux deux autres cas. Mais curieusement, les résultats de Voro-N ne sont pas plus proches des valeurs obtenues avec le cas Voro-GP que le cas Grid (sauf pour la composante de cisaillement). Si nous acceptons cet ordre de précision (e.g. pour des mesures des composantes d'élasticité du monocristal connues avec une telle précision), il n'y a pas de contre-indication à utiliser un calcul simple de type Grid pour rechercher des propriétés effectives élastiques. L'accès aux composantes transverses est alors largement simplifié puisque la mise en données du cas Grid est très simple (par rapport au cas Voro-N) et que le temps CPU n'est que de quelques secondes par réalisation ($\approx$ 50 secondes pour le cas Voro-N). A noter enfin que la composante dans la troisième direction (longitudinale) possède la même valeur que la composante du tenseur d'élasticité d'un monograin de DS200 dans le repère cristallographique.

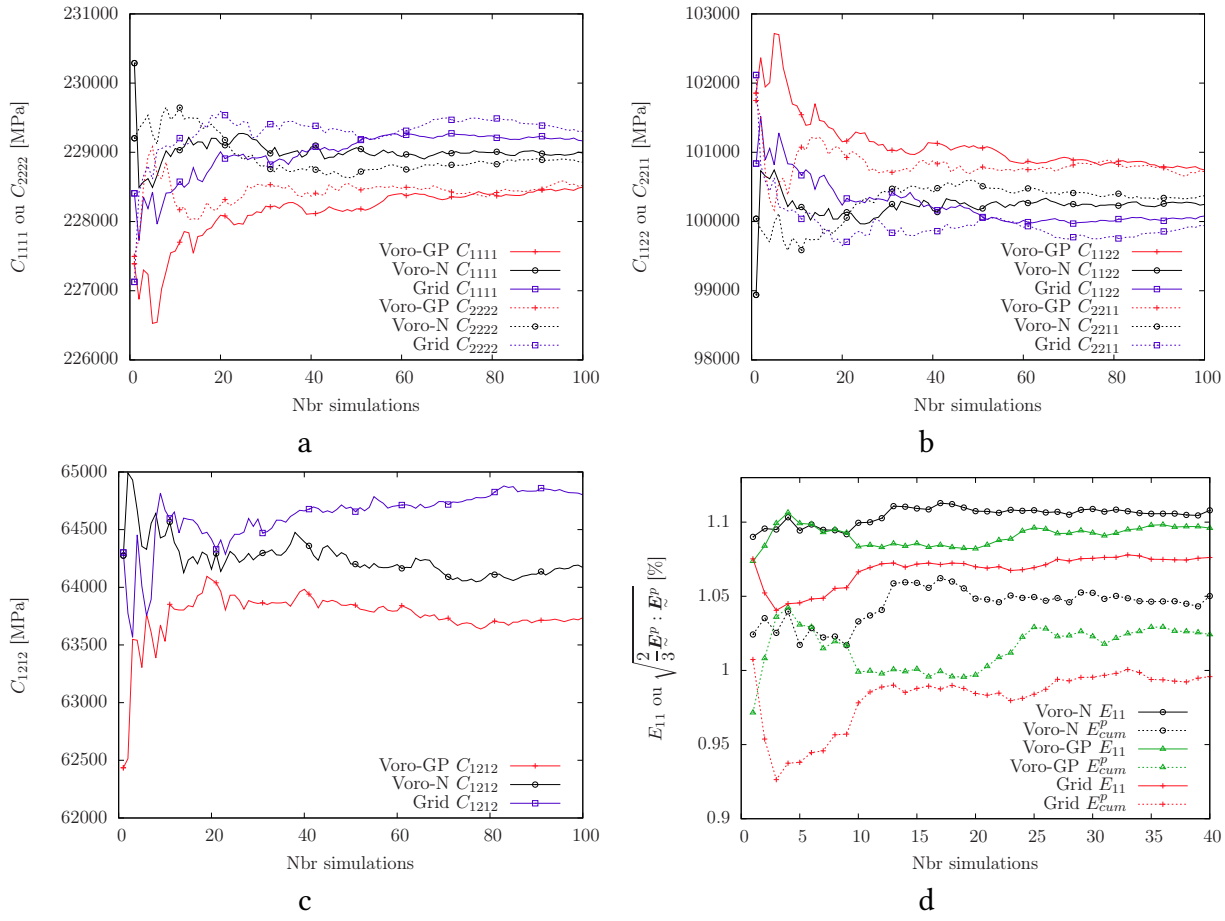


Figure 2.3 – *Evolution des propriétés mécaniques effectives en fonction du nombre de simulations pour les trois types d'agrégats. a : Composantes C_{1111} et C_{2222}. b : Composantes C_{1122} et C_{2211}. c : Composantes C_{1212}. d : déformation moyenne E_{11} et déformation plastique cumulée E^p_{cum} lors d'une traction simple en contrainte imposée avec la loi de comportement élasto-viscoplastique monocrisalline à* 650 °C.

Déformations moyennes en élasto-viscoplasticité

Dans cette partie, la réponse mécanique globale obtenue pour une traction simple dans la direction $\vec{x}_1$ est étudiée. Le chargement imposé est mixte avec une seule composante de déformation axiale fixée en moyenne, toutes les autres résultantes nulles, et des conditions aux limites périodiques. Cela revient à enrichir notre problème avec 6 nouveaux degrés de liberté qui peuvent être le tenseur d'une déformation moyenne ou d'une contrainte équivalente (ou un mélange des deux) . En 2D, les éléments périodiques ne peuvent être définis qu'en considérant que le plan du maillage reste plan (problème en contrainte plane, déformation plane ou déformation plane généralisée). On décide alors de réaliser l'étude en extrudant les surfaces sur un élément afin d'imposer des conditions de périodicité dans les 3 directions.

Dans le régime plastique, la convergence des calculs vers une variable macroscopique représentative est plus difficile à atteindre sur la déformation globale lorsque le chargement est en contrainte imposée que si l'on observe la contrainte obtenue en déformation imposée (voir l'illustration sur la figure 2.4).

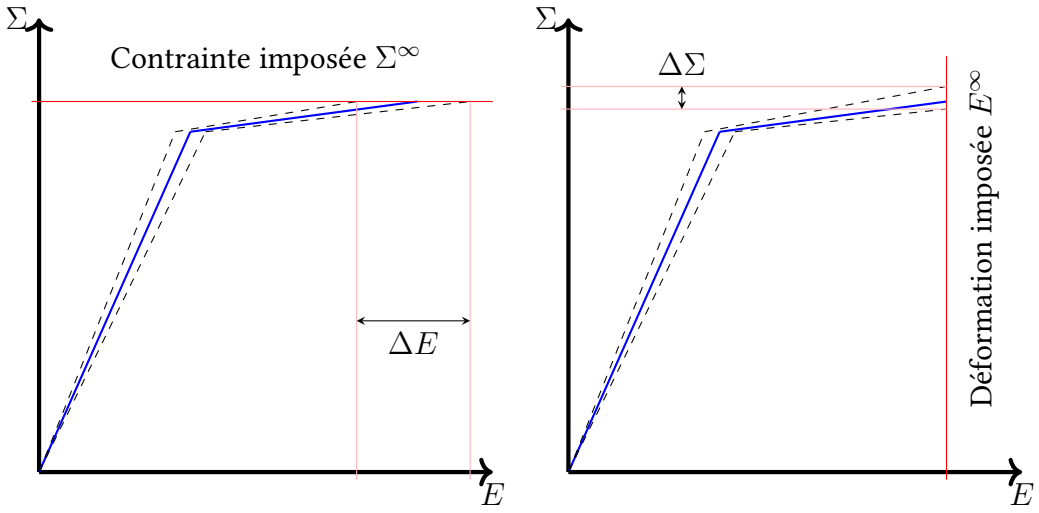


Figure 2.4 – *Schéma de principe sur la notion de représentativité macroscopique vis-à-vis d'un chargement à contrainte imposée ou à déformation imposée pour un matériau à faible écrouissage.*

A l'extrême, pour une loi de comportement locale de type « plastique parfait », la convergence vers une contrainte effective à déformation imposée serait obtenue rapidement à coup sûr puisque le module apparent élasto-plastique tendrait vers zéro. L'étude s'est donc portée sur un chargement en contrainte imposée jusqu'à $\Sigma_{11} = 900$ MPa. On étudie la convergence de la déformation macroscopique dans la direction principale E_{11} et de la déformation plastique équivalente $E^p_{cum} = \sqrt{\frac{2}{3}\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^p : \underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^p}$. L'évolution de ces deux quantités en fonction du nombre de réalisations est illustrée en figure 2.3d. Les valeurs moyennes obtenues pour 40 réalisations sont différentes pour chacun des trois cas de calcul, en particulier pour la déformation plastique équivalente. Le cas Grid semble plus raide et conduit donc à une déformation plus faible en comparaison des deux pavages de Voronoï qui convergent vers des valeurs très proches de 1.1%. Nous avons déjà fait ce constat sur les composantes du tenseur d'élasticité. Le maillage Voro-N atteint rapidement une erreur inférieure à 1% sur la déformation macro (20 réalisations) alors que la convergence est plus lente pour les deux autres jeux de données. Nous mentionnons également que l'ordre entre les résultats des trois maillages est différent. Même

si le cas Grid continue d'être le plus raide, la déformation plastique est plus prononcée dans le cas Voro-N que dans le cas Voro-GP, alors que la déformation élastique est, elle, plus importante dans le cas Voro-GP. Peut-être que la définition aux points de Gauss conduit à un lissage des sommets des grains, zones qui sont propices à la localisation de la plasticité.

Pour le comportement local étudié, les différences entre les trois agrégats considérés sont assez faibles. On obtient par exemple en traction monotone, 4% de différence entre le calcul Grid et Voro-N. On peut cependant imaginer que cette erreur est suceptible de s'amplifier si des chargements plus complexes sont réalisés, tels que des cycles en rapport de charge. A l'échelle macroscopique, nous privilégierons un calcul élasto-viscoplastique Voro-N comme référence.

2.1.2 Définition d'une quantité représentative « par phase »

Souvent dans la littérature, le VER est utilisé uniquement dans le but d'avoir une référence sur la réponse globale du matériau hétérogène. Le but de ce paragraphe est d'étudier également la réponse par phase statistiquement représentative (on parle de « SR grains » dans [Segurado et al., 2012]). En effet, le fait qu'un modèle assure une réponse correcte ne garantit pas qu'il sera réaliste à une échelle inférieure. Dans le cas de l'alliage DS, ces phases sont cristallographiques et leur orientation est définie par un seul angle d'**Euler** ϕ_1 autour de l'axe de solidification et leur morphologie est cylindrique. Une méthode possible consiste à focaliser l'étude sur un grain central en itérant sur un grand nombre de réalisations afin de faire varier l'entourage du grain ainsi que sa forme. Certes, cela permet de contrôler précisément le voisinage et la morphologie de la phase étudiée et d'éviter de prendre en considération les effets de bords engendrés par les conditions aux limites (comme des Kinematic Uniform Boundary Conditions (KUBC)). Mais il faut effectuer un grand nombre de réalisations où, en réalité, on ne s'intéresse qu'à une très petite zone : par exemple un grain parmi les 256 grains utilisés dans le calcul.

Dans cette étude, le fait d'utiliser des conditions périodiques permet d'intégrer l'ensemble des grains dans l'étude par phase car il n'y a pas d'effet de bord. Le choix de réaliser une discrétisation régulière pour l'angle ϕ_1 parmi 30 possibilités engendre la présence, dans un même calcul, de plusieurs « avatars » ayant la même orientation cristallographique mais pas la même forme ni le même voisinage. Par exemple pour vingt réalisations, près de 150 avatars sont obtenus pour chaque phase cristallographique. Un post-traitement est utilisé pour chercher dans la mise en donnée les orientations de chaque grain, puis pour réaliser une moyenne volumique sur l'ensemble des réalisations et pour toutes les orientations cristallographiques. La figure 2.5 illustre le fonctionnement du script générant des variables dites « par phases ».

Nous comparons les résultats obtenus pour 40 réalisations utilisant la mise en données Grid et Voro-N. Pour le cas Voro-GP, nous avons vu précédemment que si la grille est suffisamment fine, soit une trentaine d'éléments par grain, les réponses sont similaires à celles du cas Voro-N. Il faudrait donc envisager une étude de sensibilité au maillage, ce qui n'est pas entrepris ici. La figure 2.6 présente les résultats locaux pour le cas du chargement en traction monotone précédent, en termes de courbes contrainte-déformation pour les composantes non nulles.

Les réponses sont très voisines pour les deux types de calcul, les plus grandes différences correspondent au cisaillement transverse. Même si à l'échelle macroscopique le chargement est une traction simple, à l'échelle des grains, le voisinage introduit des sollicitations dans les autres directions. La dispersion finale sur les contraintes est de l'ordre de 200 MPa pour toutes les composantes, ce qui représente 20% de la contrainte effective, et qui est loin d'être négli-

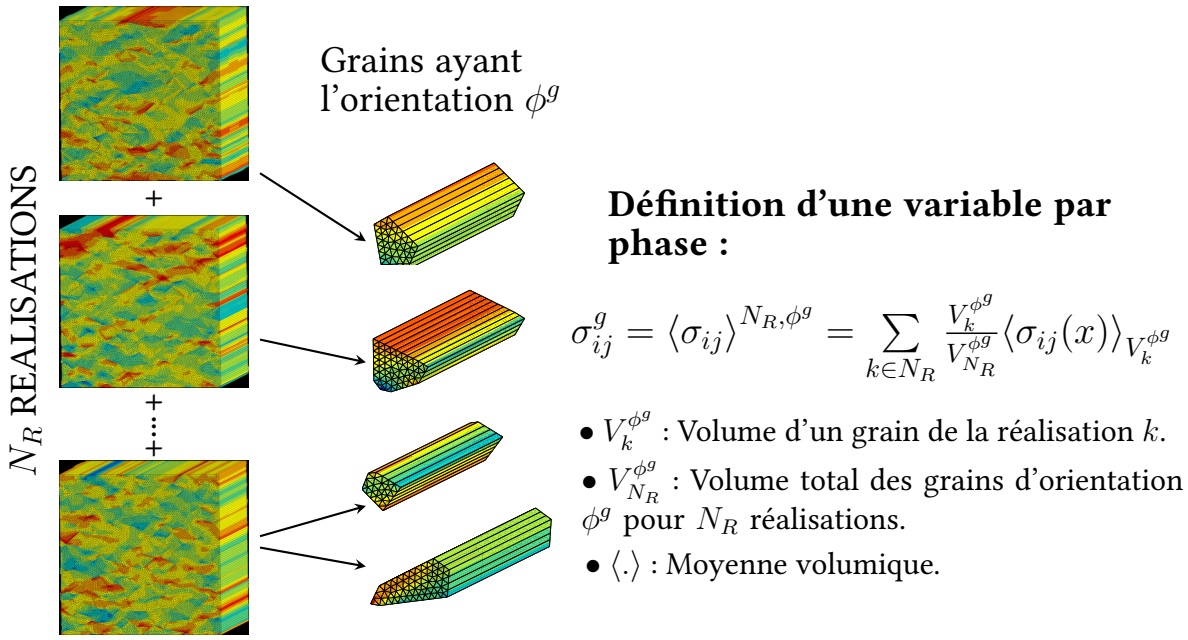


Figure 2.5 – *Schéma de définition pour les variables dites « par phase » (exemple des composantes du tenseur des contraintes σ_{ij}).*

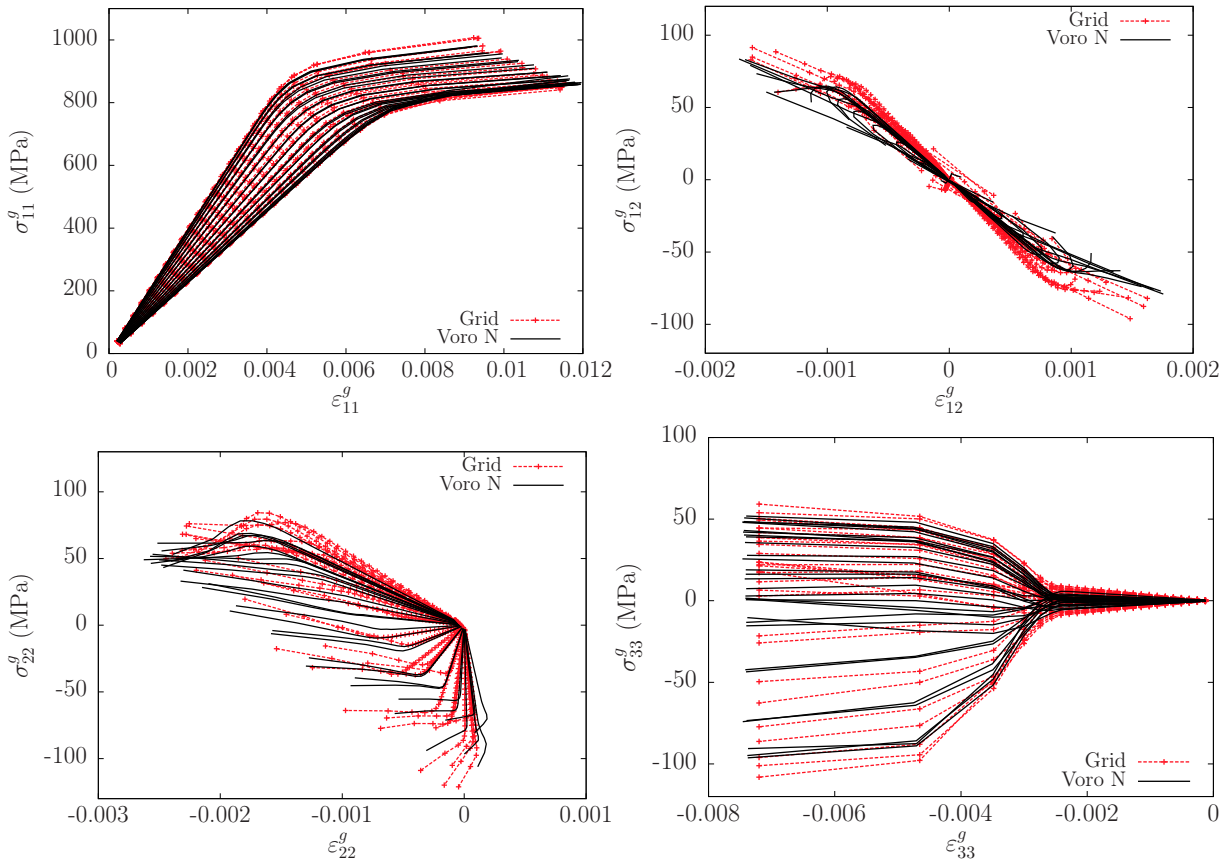


Figure 2.6 – *Réponses moyennes par phase mécanique pour le chargement monotone en contrainte défini dans la section précédente. Evolution pour toutes les composantes non nulles des tenseur de contrainte et de déformation.*

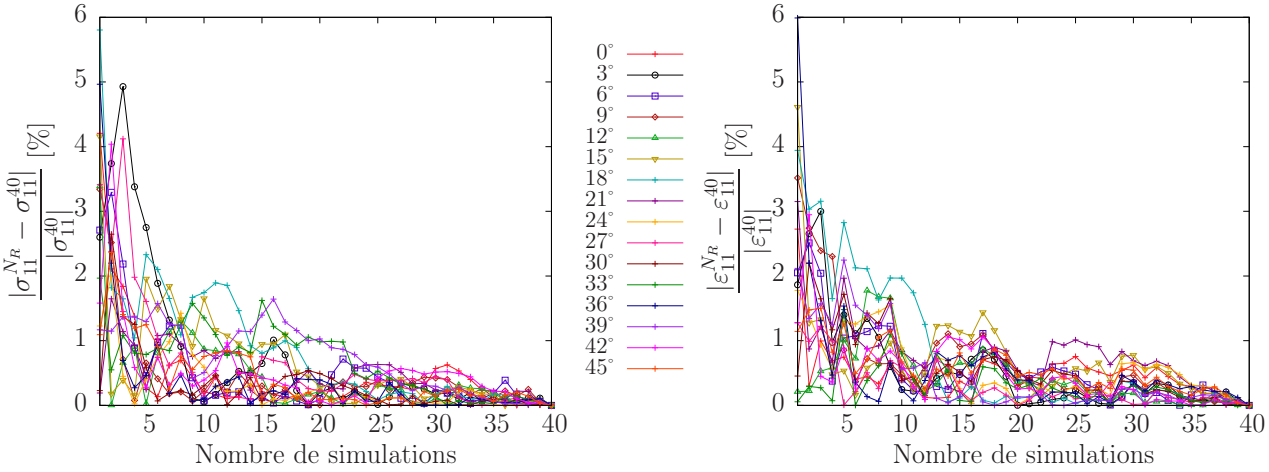
geable.

Néanmoins, il reste encore à juger de la représentativité de ces variables. Nous considérons deux estimateurs :

- la fluctuation de la valeur finale des composantes principales σ_{11} et ε_{11} pour chaque orientation en fonction du nombre de réalisations ;

- la « forme moyenne » des SR grains pour un nombre fini de réalisations.

Pour le premier estimateur, on construit une erreur relative sur la contrainte axiale dans la direction de sollicitation pour un nombre de simulations N_R, en prenant comme référence la valeur après 40 réalisations. La figure 2.7 présente les écarts pour les seize premières orientations cristallographiques $\phi_1 \in [0°, 45°]$ dans le cas de calcul « Voro N ».



a. b.

Figure 2.7 – *Evolution de l'erreur relative pour les 16 premières orientations cristallographiques en fonction du nombre de simulations utilisées pour réaliser les moyennes « par phase » à charge maximale lors de la traction monotone définie en 2.1.1 dans le cas « Voro N ». a : Contrainte principale σ_{11}^g et b : Déformation principale ε_{11}^g.*

On observe que l'erreur relative devient inférieure à 1% quasiment pour toutes les orientations à partir de 20 réalisations. Comme mentionné précédemment, cela équivaut à environ 200 avatars pour une même phase cristallographique. Cette convergence illustre l'effacement lié au calcul des variables par phase des effets de voisinage et de forme des grains individuels. De manière plus qualitative, on peut vérifier qu'en rassemblant tous les points de Gauss appartenant à une phase, on observe une répartition régulière dans le plan orthogonal à l'axe d'extrusion. Ce sera notre second estimateur. Pour ce faire, un algorithme est écrit afin de :

1. translater tous les points de Gauss de chaque grain afin d'avoir le centre de gravité de chacun confondu avec la position (0,0) dans le repère $(0, \vec{x_1}, \vec{x_2})$;

2. réaliser une homothétie pour chaque grain afin qu'ils aient la même surface.

La figure 2.8 représente la répartition des points de Gauss normés et centrés pour deux phases, $\phi_1 = 0°$ et $\phi_1 = 45°$ pour 20 réalisations.

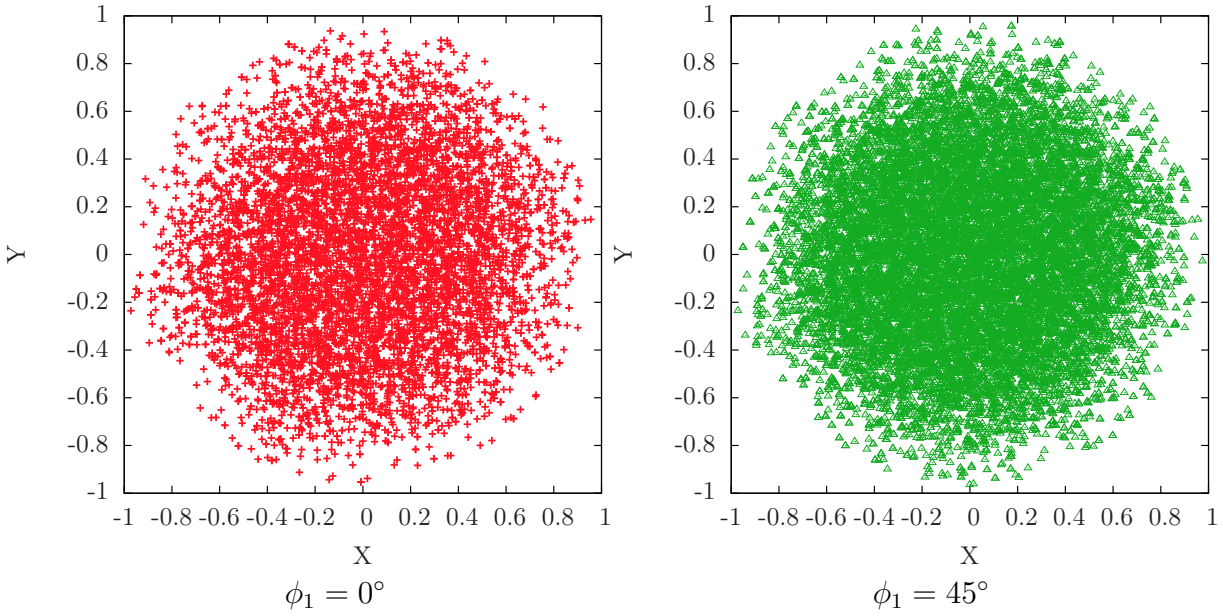


Figure 2.8 – *Répartition spatiale des points de Gauss pour les deux « SR grains » ayant deux orientations cristallographiques dans le repère* $(0, \vec{x_1}, \vec{x_2})$.

Ils se retrouvent à l'intérieur d'un disque, ce qui prouve que l'assignation aléatoire des orientations n'a pas favorisée une forme qui biaiserait la réponse moyenne pour cette phase. Toutefois, on observe un gradient de densité de points entre le contour et le cœur des grains. On pourrait le réduire, sans toutefois l'annuler, en raffinant le maillage au niveau des joints de grains dans les calculs CPFEM.

Par la méthode proposée, la totalité du volume calculé est exploitée dans la définition des variables dites « par phase ». Nous obtenons ainsi des quantités représentatives, $i.e.$ avec une fluctuation de la réponse inférieure à 1%, pour seulement une vingtaine de réalisations. Ce type de quantité pourra être comparé aux estimations locales fournies par les méthodes d'homogénéisation du polycristal. Cependant, cette méthode a des limites. La première est la discrétisation régulière des valeurs d'orientations (un angle d'Euler) possibles qui ne permet d'examiner qu'un faible sous-espace des possibilités réelles à considérer. Par ailleurs, le même agrégat est utilisé pour toutes les réalisations. Un nouveau VER pourrait être reconstruit à chaque réalisation pour balayer un plus large spectre de couples (orientations cristallographiques du voisinage + morphologie des grains du voisinage). D'autres indicateurs sur la représentativité des moyennes définies pourraient être construits afin de vérifier, par exemple, qu'aucune orientation cristallographique est trop présente (ou pas assez) dans le voisinage d'une phase donnée.

Etonnament, le calcul de type Grid pourrait être utilisé à cette échelle, car les tendances obtenues pour chaque orientation sont similaires à celles du cas Voro-N. De fait, l'ordre de grandeur de l'erreur qu'il y a entre les deux types de calcul est similaire aux écarts qui existent entre les méthodes d'homogénéisation comme nous le montrerons dans la suite. Ceci pose le problème de savoir lequel est le plus précis puisque nous sommes dans la zone d'incertitude, et a conforté finalement notre choix pour le type de calcul Voro-N comme référence.

Enfin, décrire la réponse du VER uniquement par la moyenne globale et « par phase » est

encore insuffisant, dans la mesure où par exemple la valeur de la déformation à proximité d'un joint de grains peut atteindre deux fois la déformation locale moyenne pour l'orientation considérée. Il faut donc analyser les résultats à une échelle plus locale et caractériser la fluctuation du champ, notamment si on cherche à prédire un amorçage. C'est l'objet du prochain paragraphe.

2.1.3 Quantification de la fluctuation intra-granulaire

La réponse « par phase » traitée dans la section précédente reste une caractérisation grossière des mécanismes locaux qui existent au sein du VER. Par exemple, nous représentons sur la figure les composantes du tenseur de contrainte en fonction des composantes du tenseur de déformation pour une seule réalisation avec le cas Voro-N mais à tous les points de Gauss (pas de moyenne) (voir la figure 2.9).

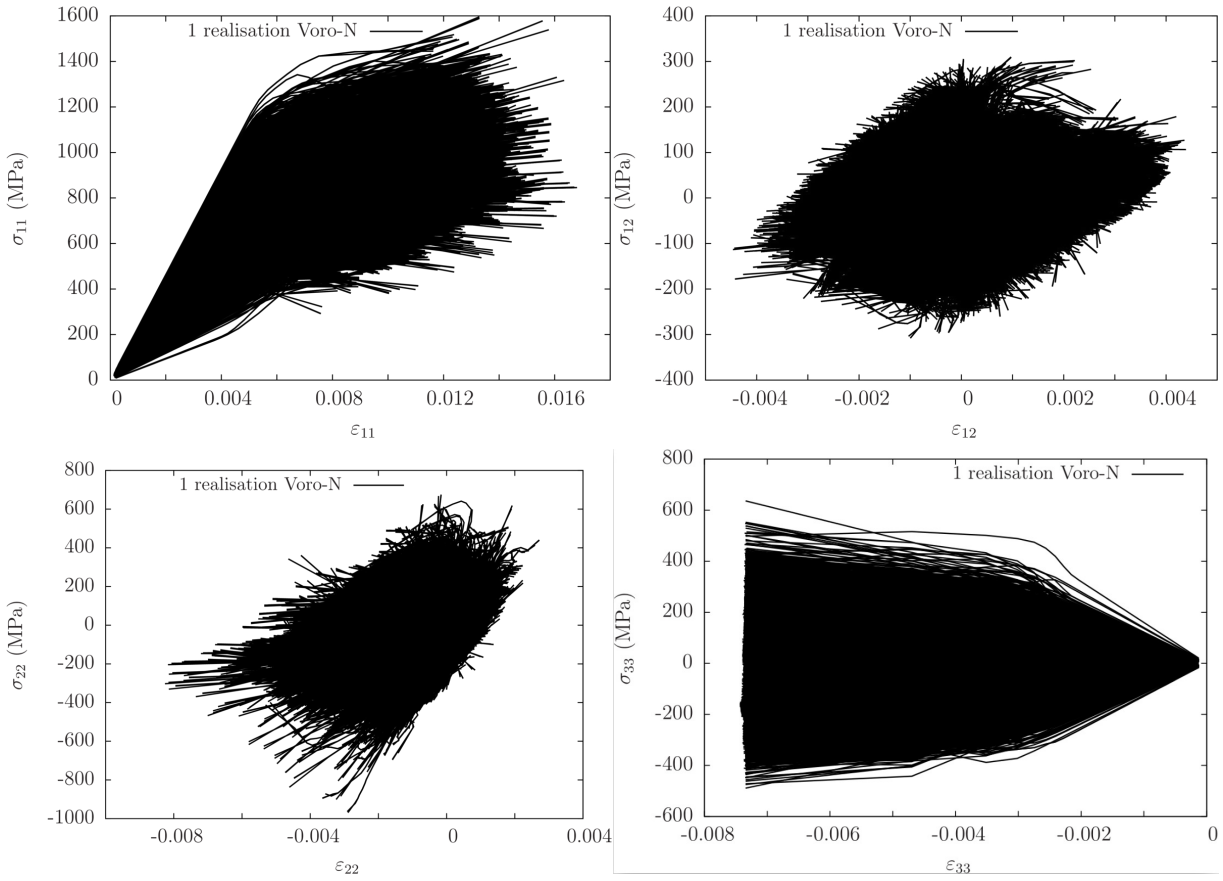


Figure 2.9 – *Réponses à tous les points de Gauss pour le chargement monotone en contrainte défini dans la section précédente. Evolution pour toutes les composantes non nulles des tenseur de contrainte et de déformation.*

Par rapport à la figure 2.6 où les variables étaient moyennées par phase cristallographique, les réponses sont bien plus dispersées sur la figure 2.9. Cela montre bien qu'une moyenne par phase cristallographique réduit considérablement l'hétérogénéité obtenue par un calcul en champ complet. Avec une autre façon d'illustrer ce propos, la figure 2.10 présente les cartographies de l'erreur relative entre la contrainte ou la déformation axiale en chaque point dans l'axe de sollicitation et les valeurs correspondantes « par phase » définies à partir de 40 réalisa-

tions. La comparaison est effectuée en fin de chargement, pour une contrainte macroscopique de $900\,\mathrm{MPa}$.

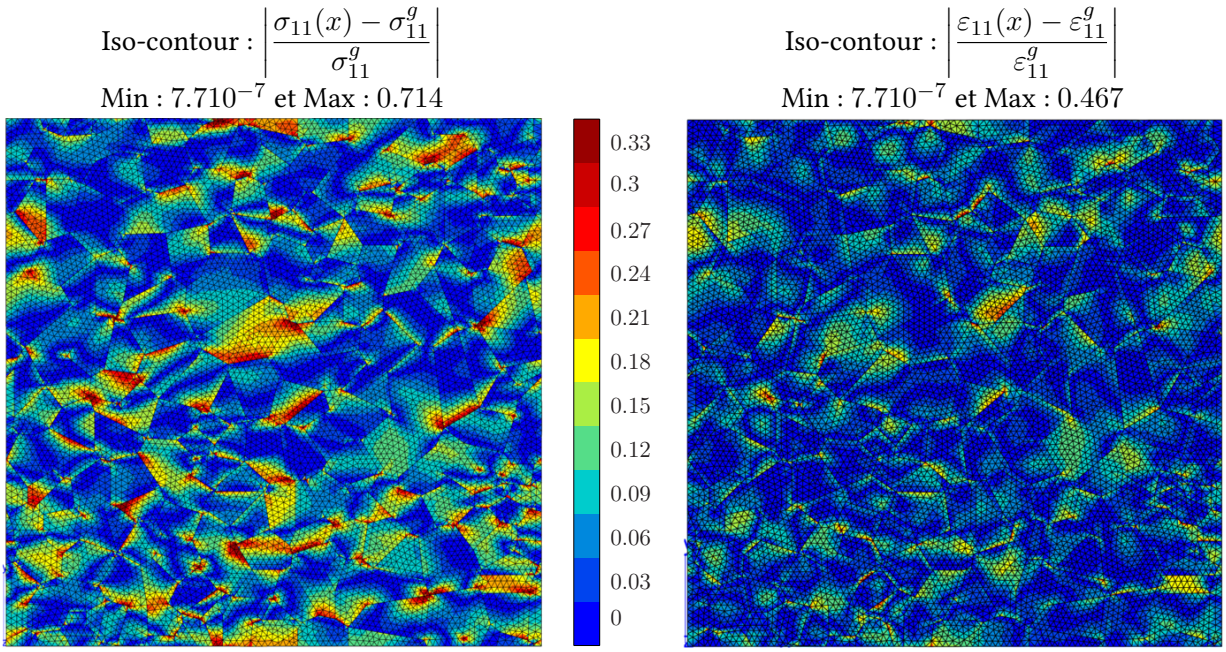


Figure 2.10 – *Cartographies de l'erreur relative pour les composantes axiales de la contrainte et la déformation entre la valeur en chaque point et la quantité « par phase ».*

Etonnamment, l'erreur exprimée en contrainte est plus élevée que celle en déformation alors qu'on imaginerait une localisation plus importante pour cette dernière. Le chargement n'est peut-être pas suffisant pour voir apparaître une plasticité importante ($E_{11}^p = 0,5\%$), c'est l'hétérogénéité élastique qui reste prépondérante sur ce résultat. D'autre part, on remarque que dans les deux cas la fluctuation est localisée au niveau des joints de grains. Cette localisation intra-granulaire au sein du VER a été précédemment étudiée par **Barbe** [Barbe et al., 2003, Barbe et al., 2001b, Barbe et al., 2000], qui a observé l'évolution de la déformation et de la contrainte en fonction de la distance aux joints et la convergence des points vers une valeur moyenne au cœur de chaque grain. Suivant [Rekik et al., 2015], nous cherchons également à caractériser comment les variables évoluent autour de la moyenne pour chaque phase cristallographique. Pour cela, les valeurs de chaque variable sont évaluées pour tous les points de Gauss et triées par phase. Ensuite, le nuage de point est échantillonné afin d'obtenir une probabilité d'apparition d'une valeur comprise dans un intervalle donné. La figure 2.11 montre la fonction de répartition pour différentes orientations cristallographiques et pour 100 réalisations lors d'un essai de traction monotone purement élastique à charge imposée $\Sigma_{11} = 36\,\mathrm{MPa}$. On compare les deux types d'agrégats Grid et Voro-N.

La fonction de distribution est bien « lisse » dans le cas Voro-N, ce qui n'est pas le cas pour le maillage Grid. Il est difficile de dire si en rajoutant des éléments au sein de chaque grain du calcul Grid, on aurait exactement les mêmes résultats ou si la simplification assumée du problème resterait visible. A partir de ces résultats, on pourrait alors construire une variance ou un écart-type du champ mécanique pour chaque phase (cela sera fait dans la partie 2.3.1). Il est important de mentionner que ces quantités sont légèrement plus sensibles au maillage, en particulier au niveau des queues de distribution. Néanmoins, nous n'avons pas constaté une

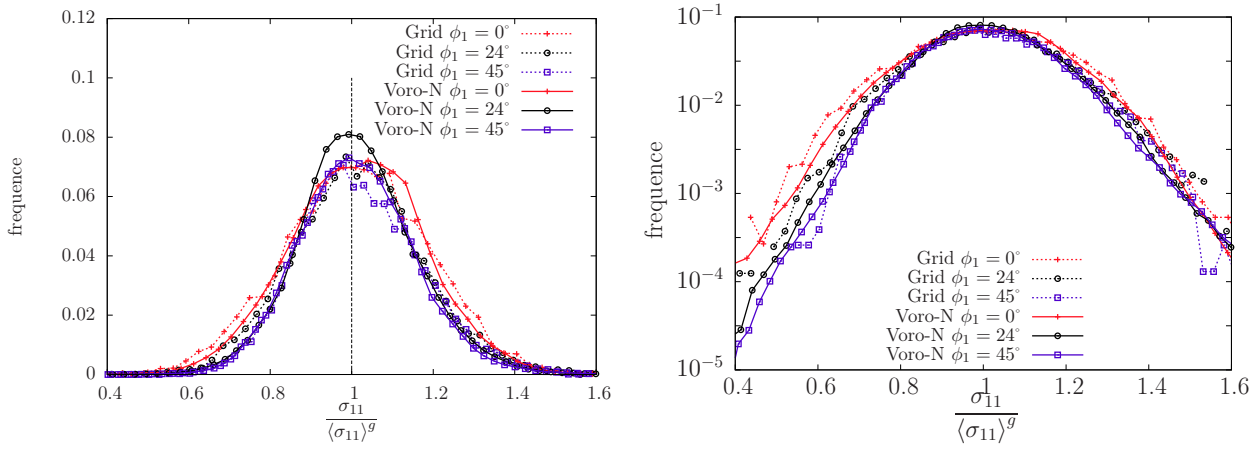


Figure 2.11 – *Répartition de la contrainte axiale σ_{11} pour trois phases cristallographiques et deux types d'agrégat (Voro-N et Grid) normée par rapport à la contrainte moyenne volumique calculée précédemment (échelle linéaire à gauche, échelle logarithmique à droite).*

grosse différence sur la variance moyenne par phase : la précision est de l'ordre de 1% sachant que la précision sur la moyenne volumique est du même ordre.

2.2 Une modélisation simplifiée du problème polycristallin : l'approche macroscopique

Les modèles phénoménologiques, basés sur des considérations uniquement macroscopiques, occupent encore de nos jours une place importante dans la simulation numérique à l'échelle industrielle, cela malgré les efforts de la recherche dans le développement de méthodes plus physiques couplant les échelles. En cause principalement, il y a la simplicité de mise en œuvre demandée par les bureaux d'étude afin de pouvoir coupler les phénomènes physiques (thermique, aérodynamique, ...). Ainsi, l'augmentation de la puissance de calcul ouvre essentiellement la voie à des maillages avec un nombre d'éléments toujours plus élevé, sur des géométries très proches des pièces réelles complexes (profil d'aube, canaux de refroidissement, ...) voire de sous-systèmes complets (aube-disque, ...). Enfin, la littérature sur ces modèles mécaniques est riche et de nombreux phénomènes observables sur les courbes expérimentales ont été décrits par des variables internes aux évolutions restant à déterminer. C'est sur ce point que réside la difficulté et où l'expérience du mécanicien fait la différence. Sous réserve d'avoir mis les bons ingrédients dans le modèle, l'identification se ramène à un problème d'optimisation se référant aux courbes macroscopiques expérimentales. La qualité du modèle est donc tributaire de ces facteurs. Des progrès récents des techniques expérimentales et des approches théoriques ont permis l'introduction de méthodes d'identification s'appuyant sur les mesures de champs (au lieu de valeurs globales) de déplacement, obtenues par corrélation/stéréo-corrélation d'images, ce qui fournit une information plus riche au processus de caractérisation des paramètres matériau. Cela est en particulier vrai pour des champs de déplacement très hétérogènes comme ceux qui sont observés dans une éprouvette à double entaille [Réthoré et al., 2013, Pottier et al., 2011]. Enfin, pour certains paramètres comme les coefficients d'un critère de plasticité anisotrope, des simulations en champ complet peuvent servir à l'identification [Zhang et al., 2016]. Avec ces nouveaux outils, il n'est plus rédhibi-

toire de vouloir construire un modèle à grand nombre de paramètres. On fera alors appel à un « laboratoire numérique ». Néanmoins, l'approche phénoménologique requiert $de\ facto$ l'augmentation drastique du nombre de paramètres pour introduire l'anisotropie du matériau. Les coefficients qui été jusqu'à présent des scalaires deviennent en effet des tenseurs permettant de modifier la réponse en fonction des directions du chargement. Après quelques généralités sur la structure d'un modèle mécanique, nous aborderons trois modèles utilisés/développés pour les superalliages DS afin de voir comment l'anisotropie du matériau y est traduite.

2.2.1 Structure générale d'un modèle mécanique macroscopique

Le cadre thermodynamique des processus irréversibles dont sont issus les modèles ne sera pas discuté ici (le lecteur pourra se référer par exemple au premier chapitre de [Besson et al., 2001]). Dans la suite, on se place sous l'hypothèse des petites déformations comme cela était le cas dans le chapitre 1. Une décomposition additive de la déformation totale présente alors :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{el} + \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{in} \tag{2.1}$$

En dessous du seuil de (visco-) plasticité, le matériau présente un comportement linéaire élastique. Pour un alliage DS, et en supposant qu'un nombre suffisant de grains est présent à l'échelle d'un élément, le tenseur d'élasticité macroscopique a une symétrie isotrope transverse. En prenant l'axe $\vec{x_3}$ comme direction longitudinale (direction de solidification de l'alliage), il est représenté en notation de **Voigt** par la matrice suivante, où figurent 5 composantes indépendantes :

$$[C] = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \end{pmatrix}$$

Nous avons montré précédemment que les composantes transverses C_{11} et C_{12} peuvent être obtenues en utilisant des calculs par éléments finis.

Contrairement au cas de la plasticité cristalline, la frontière entre les domaines élastique et plastique ne se définit plus simplement à partir de considérations cristallographiques. Ainsi, une grande souplesse existe dans la définition de cette contrainte équivalente, qui sera à comparer avec une valeur seuil. Souvent, elle est construite sur la base des invariants du déviateur des contraintes pour les symétries du matériau. Si l'on se place dans le cas d'un matériau isotrope, on peut citer principalement :

le critère de von Mises : il s'agit d'un critère énergétique qui postule que l'énergie de distorsion élastique, calculée à l'aide du déviateur du tenseur des contraintes, ne peut dépasser une valeur critique. Il en découle le calcul d'une contrainte équivalente dépendant du second invariant. On utilise souvent la racine carrée de celui-ci, avec un coefficient qui norme la valeur par rapport à la traction simple. On introduit ainsi $J(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}})$:

$$\sigma_{eq}(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}) = J(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}) = \sqrt{\frac{3}{2}\underset{\sim}{\boldsymbol{s}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{s}}} \tag{2.2}$$

où $\underset{\sim}{\boldsymbol{s}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} - \frac{1}{3}Tr(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}})\underset{\sim}{\boldsymbol{I}}$;

le critère de Tresca : il s'agit de comparer le cisaillement maximal dans le repère des contraintes principales (tenseur diagonal) à une valeur critique, la contrainte équivalente s'écrit alors :

$$\sigma_{eq}(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}) = max_{i\neq j}(|\sigma_i - \sigma_j|) \qquad i,j \in [I, II, III] \tag{2.3}$$

Ce critère fait intervenir le deuxième et le troisième invariant du tenseur des contraintes.

Cette contrainte équivalente est appréciée par rapport à une valeur nominale maximale admissible (typique du matériau) pour obtenir la fonction seuil :

$$f(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}) = \sigma_{eq}(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}) - R_0 \tag{2.4}$$

La donnée de cette contrainte équivalente permet de construire un modèle de « plasticité parfaite » (sans viscosité ni écrouissage), qui fait à nouveau intervenir les trois régimes de fonctionnement :

$$\begin{cases} (1.) & f(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}) < 0 & \text{élasticité} \\ (2.) & f(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}) = 0, \dot{f}(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}) < 0 & \text{décharge élastique} \\ (3.) & f(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}) = 0, \dot{f}(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}) = 0 & \text{écoulement plastique} \end{cases} \tag{2.5}$$

Si la surface de charge présente des coins (cas d'une contrainte équivalente continue par morceaux), la condition de cohérence ($\dot{f}(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}) = 0$) ne suffit pas à décrire l'écoulement plastique au croisement des hyperplans, la normale n'étant pas définie simplement à cet endroit. Ce problème a déjà été discuté dans la partie précédente et sera écarté en ajoutant un effet visqueux si un tel critère est adopté.

Le comportement plastique du matériau est souvent enrichi en utilisant des équations différentielles pour traduire l'écrouissage, isotrope et/ou cinématique. En se basant sur l'approche unifiée proposée par **Chaboche** [Lemaitre and Chaboche, 1985], où la déformation inélastique rend compte à la fois de la plasticité et du fluage, on peut formuler l'écoulement plastique macroscopique selon :

$$\begin{cases} f(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}, \underset{\sim}{\boldsymbol{X}}, R) &= |\sigma_{eq}(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{X}})| - r_0 - R \\ \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{vp} &= \left\langle \frac{f(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}, \underset{\sim}{\boldsymbol{X}}, R)}{K} \right\rangle^n \frac{\partial f}{\partial \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}} = \dot{p}\underset{\sim}{\boldsymbol{n}} \\ \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\alpha}}} &= (\underset{\sim}{\boldsymbol{n}} - \tfrac{3}{2}\tfrac{D}{C}\underset{\sim}{\boldsymbol{X}})\dot{p},\ \underset{\sim}{\boldsymbol{X}} = \tfrac{2}{3}C\underset{\sim}{\boldsymbol{\alpha}} \\ \dot{r} &= (1 - \tfrac{R}{Q})\dot{p},\ R = bQr \end{cases} \tag{2.6}$$

Cette forme de modèle [Chaboche, 1989] est largement utilisée dans les codes de calcul. L'avantage principal réside dans la grande modularité des différentes équations différentielles : on supprime/ajoute des termes dans l'évolution des variables internes en fonction des phénomènes physiques prépondérants dans le matériau. On peut aussi rajouter facilement d'autres potentiels viscoplastiques pour traduire des réponses variant avec la vitesse de chargement (cela est utilisé par SAFRAN pour modéliser d'une part le fluage et de l'autre la traction). La porte est ouverte à une multitude de possibilités de décrire le matériau. Pour traiter d'un matériau anisotrope, comme les alliages DS, les équations sont nécessairement plus complexes. Par exemple, le critère de von Mises peut être généralisé à un matériau anisotrope sous la forme :

$$\sigma^{eq}(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}) = \left[\underset{\sim}{\boldsymbol{s}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{M}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{s}}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{2.7}$$

où $\underset{\approx}{\boldsymbol{M}}$ est un tenseur d'ordre 4, de symétrie isotrope transverse dans notre cas. Il reste alors à vérifier que les équations régissant l'évolution des variables internes d'écrouissage dépendent ou non de la direction de chargement. Si oui, il faudra complexifier celles-ci afin d'obtenir une déformation anisotrope de la surface de charge initiale. La partie suivante détaille différents modèles macroscopiques développés pour les alliages à solidification dirigée.

2.2.2 Introduction de l'anisotropie du matériau DS

Pour éviter un temps de calcul important et faciliter l'implémentation dans les codes de calculs industriels, les recherches sur le comportement mécanique des alliages DS conduisent essentiellement à des modèles macroscopiques ayant le formalisme décrit ci-dessus. Trois types de stratégies sont mises en place pour obtenir un modèle qui s'adapte aux données expérimentales disponibles et au type de dimensionnement souhaité :

- recherche d'un nouveau critère adapté à un matériau isotrope transverse ;
- recherche d'une évolution anisotrope des variables internes d'écrouissage ;
- ajout d'autres variables internes permettant une dépendance de la réponse mécanique avec la température ou « aux systèmes de glissement activés ».

Modèle de Shenoy

Le modèle de **Shenoy et al.** est développé dans le cadre des grandes déformations. On se propose d'en décrire une forme adaptée au cas des petites déformations pour assurer une continuité dans le formalisme employé précédemment. Le choix des auteurs était de construire un modèle anisotrope fonctionnant sous chargement thermo-mécanique. En cela, la variable température intervient à la fois dans le critère pour réduire l'anisotropie de celui-ci à haute température, et dans les variables internes proposées. Pour le critère, l'idée principale du modèle est d'utiliser les invariants de la symétrie du matériau. Pour cela, on définit le vecteur directeur de l'axe longitudinal, $\vec{d_0}$. Les invariants admissibles dans le cas d'un agrégat DS sont [Shenoy et al., 2006] :

$$Tr(\underset{\sim}{\boldsymbol{M}}),\ Tr(\underset{\sim}{\boldsymbol{M}}^2),\ Tr(\underset{\sim}{\boldsymbol{M}}^3),\ Tr(\underset{\sim}{\boldsymbol{s}}),\ Tr(\underset{\sim}{\boldsymbol{s}}^2),\ Tr(\underset{\sim}{\boldsymbol{s}}^3) \tag{2.8}$$

et

$$Tr(\underset{\sim}{\boldsymbol{M}}\underset{\sim}{\boldsymbol{s}}),\ Tr(\underset{\sim}{\boldsymbol{M}}^2\underset{\sim}{\boldsymbol{s}}),\ Tr(\underset{\sim}{\boldsymbol{M}}\underset{\sim}{\boldsymbol{s}}^2),\ Tr(\underset{\sim}{\boldsymbol{M}}^2\underset{\sim}{\boldsymbol{s}}^2) \tag{2.9}$$

où $\underset{\sim}{\boldsymbol{M}} = \vec{d_0} \otimes \vec{d_0}$. Certains invariants ont des propriétés mathématiques permettant de réduire leur nombre telles que :

$$\begin{cases} Tr(\underset{\sim}{\boldsymbol{M}}) = Tr(\underset{\sim}{\boldsymbol{M}}^2) = Tr(\underset{\sim}{\boldsymbol{M}}^3) = 1 \\ Tr(\underset{\sim}{\boldsymbol{M}}\underset{\sim}{\boldsymbol{s}}) = Tr(\underset{\sim}{\boldsymbol{M}}^2\underset{\sim}{\boldsymbol{s}}),\ Tr(\underset{\sim}{\boldsymbol{M}}^2\underset{\sim}{\boldsymbol{s}}^2) = Tr(\underset{\sim}{\boldsymbol{M}}\underset{\sim}{\boldsymbol{s}}^2) \end{cases} \tag{2.10}$$

En se limitant aux invariants d'ordre inférieur ou égal à 2, la contrainte équivalente est exprimée (critère de Robinson) comme :

$$\sigma^{eq}(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{X}}) = \sqrt{3(J_2 - \xi(J - J_0^2) - \frac{3}{4}\zeta J_0^2)} \tag{2.11}$$

où $J_2 = \frac{1}{2}(\underset{\sim}{s}-\underset{\sim}{X}) : (\underset{\sim}{s}-\underset{\sim}{X})$, $J_0 = \underset{\sim}{M} : (\underset{\sim}{s}-\underset{\sim}{X})$ et $J = \underset{\sim}{M} : ((\underset{\sim}{s}-\underset{\sim}{X})(\underset{\sim}{s}-\underset{\sim}{X}))$. Les constantes ξ et ζ sont des paramètres matériau qui évoluent en fonction de la température. On remarque que si l'on prend ξ et ζ nuls, on retrouve le critère de von Mises. Le modèle est développé sans écrouissage isotrope et avec un écrouissage cinématique non linéaire qui s'écrit :

$$\dot{\underset{\sim}{X}} = H(L\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{in} - \underset{\sim}{\pi}\dot{p}) - R_X(\sigma^{eq}(\underset{\sim}{X}))^m \underset{\sim}{\pi} \tag{2.12}$$

et

$$\underset{\sim}{\pi} = \underset{\sim}{X} - \xi[(\underset{\sim}{M}\underset{\sim}{X})^t + (\underset{\sim}{X}\underset{\sim}{M})^t - 2(\underset{\sim}{M} : \underset{\sim}{X})\underset{\sim}{M}] - \frac{3}{2}\zeta \underset{\sim}{M} : \underset{\sim}{X}(\underset{\sim}{M} - \frac{1}{3}\underset{\sim}{I}) \tag{2.13}$$

Les auteurs négligent l'écrouissage isotrope car la réponse mécanique cyclique en contrainte/déformation est directement stabilisée dans les essais pour chaque température appliquée. Le modèle macroscopique est identifié sur des courbes de fatigue à « faible nombre de cycles » (LCF) et thermo-mécanique dans le sens longitudinal et le sens transverse [Shenoy et al., 2005]. Le terme de restauration statique (terme en $(\sigma^{eq}(\underset{\sim}{X}))^m$ dans l'équation 2.12) permet de simuler le fluage secondaire.

Modèle de Yaguchi

Le modèle de **Yaguchi et al.** est développé dans le formalisme des petites déformations. Les auteurs utilisent un critère de von **Mises** (isotrope) pour caractériser le seuil initial de plasticité du matériau DS (dans [Yaguchi et al., 2007]). L'anisotropie du matériau est alors présente uniquement dans la variable d'écrouissage cinématique. Pour justifier ce choix, les auteurs montrent des essais expérimentaux de traction balayant des directions entre longitudinale et transverse. Ils observent alors une réduction de l'anisotropie, essentiellement cristallographique, lorsque la température augmente. De même que dans le modèle précédent, l'écrouissage isotrope est négligé. La déformation plastique est décomposée en deux termes correspondant aux contributions des systèmes de glissement octaédriques et « macroscopiquement cubiques » de la maille élémentaire CFC :

$$\underset{\sim}{\varepsilon}^{in} = \underset{\sim}{\varepsilon}^{in}_{octa} + \underset{\sim}{\varepsilon}^{in}_{cub} \tag{2.14}$$

chaque déformation plastique élémentaire est définie par un potentiel, qui possède sa propre valeur seuil R_0 et sa propre variable interne d'écrouissage cinématique $\underset{\sim}{X}$:

$$\dot{\underset{\sim}{X}}^j = \underset{\approx}{N}^j : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{in}_j - \underset{\approx}{Q} : \underset{\sim}{X}^j\dot{p}^j - [J^j(\underset{\sim}{X}^j)]^{m-1}\underset{\approx}{Z}^j : \underset{\sim}{X}^j \quad j \in [octa,\ cub] \tag{2.15}$$

avec

$$J^j(\underset{\sim}{X}^j) = \sqrt{\underset{\sim}{X}^j : \underset{\approx}{T}^j : \underset{\sim}{X}^j} \quad j \in [octa,\ cub] \tag{2.16}$$

Ce choix est intimement lié aux essais expérimentaux multi-axiaux de type traction-torsion réalisés. En régime de torsion pure sur un tube ayant pour axe la direction longitudinale, c'est le potentiel « cubique » qui est activé, alors que c'est le potentiel « octaédrique » qui entre en jeu pour le cas de la traction simple. On voit apparaître dans l'évolution de la variable d'écrouissage cinématique la même structure que pour le modèle de **Shenoy** *i.e.* un premier terme d'écrouissage en $\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{in}_j$, un second pour la restauration dynamique en $\dot{p}^j$ et un troisième pour la restauration statique (fluage secondaire et relaxation) en $[J^j(\underset{\sim}{X}^j)]^{m-1}$. Le modèle arbore un nombre de paramètres à identifier élevé ; les auteurs proposent plusieurs simplifications afin de réduire ce nombre (en particulier une contribution isotrope des deux premiers termes des variables d'écrouissage [Yaguchi, 2012]). Un modèle équivalent a été développé dans [Dong et al., 2014] avec un critère de plasticité cubique c'est-à-dire que le tenseur $\underset{\approx}{M}$ dans (2.7) possède trois composantes indépendantes.

Modèle utilisé par Snecma

Les aubes de turbines sont pour le moment dimensionnées en utilisant un comportement purement élastique, supposant une symétrie isotrope transverse du matériau. Néanmoins, il est entendu que les aubes des premiers étages dits « basse pression » présentent localement des déformations irréversibles. Cela reste un axe d'amélioration. Toutefois, une loi matériau élasto-viscoplastique est définie pour le DS200 pour un calcul en fluage (maintien de la force centrifuge). La partie viscoplastique du modèle mécanique est alors constituée de deux potentiels permettant d'obtenir les réponses pour des gammes de vitesses lentes « type fluage » et rapides « type traction », le potentiel « lent » se réduisant à un simple modèle de **Norton**, sans seuil ni écrouissage. Les équations du modèle peuvent s'écrire :

$$\left\{\begin{array}{rcl} \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{vp} & = & \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_r^{vp} + \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_l^{vp} \\ \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_r^{vp} & = & \left\langle \dfrac{f_r(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}, \underset{\sim}{\boldsymbol{X}})}{K_r} \right\rangle^{n_r} \dfrac{\partial f_r}{\partial \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}, \quad f_r(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}, \underset{\sim}{\boldsymbol{X}}) = |\sigma_{eq}(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{X}})| - r_{0,r} \\ \underset{\sim}{\boldsymbol{X}} & = & \frac{2}{3} C \underset{\sim}{\boldsymbol{\alpha}}, \ \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\alpha}}} = \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{in} - \frac{3}{2}\frac{D}{C} \underset{\sim}{\boldsymbol{\alpha}} \dot{p} \\ \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_l^{vp} & = & \left\langle \dfrac{f_l(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}})}{K_l} \right\rangle^{n_l} \dfrac{\partial f_l}{\partial \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}, \quad f_l(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}) = |\sigma_{eq}(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}| - r_{0,l} \end{array}\right. \tag{2.17}$$

avec l pour les vitesses lentes et r pour les rapides. La fonction f_j avec $j \in [l, r]$ est définie par le critère isotrope de von **Mises**.

2.3 Un niveau intermédiaire dans la représentation d'un agrégat cristallin : l'approche en champ moyen

Le but de notre travail est d'introduire les effets de l'orientation cristallographique, afin d'être en mesure par exemple d'estimer la variation du seuil de plasticité si nous admettons une désorientation primaire de $20\,^\circ$ (angle entre l'axe <001> des grains et l'axe $\vec{x_3}$ macroscopique). Les modèles macroscopiques tels que ceux qui ont été détaillés dans le paragraphe précédent ne fournissent pas de réponse, même approchée, à cette question qui est pourtant cruciale pour les applications industrielles.

La modélisation en champ complet et l'approche macroscopique constituent des extrêmes dans la caractérisation mécanique du polycristal. La première s'attache à représenter l'alliage de la façon la plus réaliste possible dans le cadre de la mécanique des milieux continus classiques. Chaque grain possède alors une orientation cristallographique, une morphologie et un nombre fini de voisins introduits explicitement dans le calcul. La seconde s'appuie sur les symétries visibles afin de déterminer un jeu de paramètres nécessaires pour qu'après identification, la réponse numérique globale soit en accord avec l'observation expérimentale (ou plus récemment des simulations plus riches). L'approche qualifiée d'intermédiaire qui est proposée dans cette partie considère comme un acquis la modélisation du comportement d'un grain isolé (voir le chapitre 1 pour le DS200). Les techniques d'homogénéisation vont chercher à définir des ponts permettant la montée vers l'échelle de l'agrégat pour faire communiquer les sollicitations imposées et la réponse locale. On se doute que cette transition va dépendre essentiellement du comportement local (les grains) et de la texture cristallographique. Trois cas adaptés à la microstructure DS sont considérés : le comportement linéaire élastique, puis des linéarisations possibles en plasticité (dépendante ou non du temps), et enfin le cas général

élasto-viscoplastique. Un dernier paragraphe discutera d'autres méthodes, développées ou en développement, sur la réduction du modèle de comportement polycristallin en champ complet.

2.3.1 Point de départ de l'homogénéisation en élasticité linéaire

Supposons que le milieu soit hétérogène et que le comportement de chaque phase g soit connu. Dans le cas linéaire élastique, le comportement de chaque phase isolée peut se résumer à :

$$\begin{cases} \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} &= \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{g}} \\ \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{g}} &= \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{g} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} \end{cases} \tag{2.18}$$

où $\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g}$ est le tenseur d'élasticité du grain g, et où $\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{g} = (\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g})^{-1}$ représente le tenseur des souplesses élastiques du grain g. Le problème d'homogénéisation revient à chercher une relation liant la contrainte macroscopique $\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}$ et la déformation macroscopique $\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}$, définies sur un élément de volume représentatif de volume V, par :

$$\begin{cases} \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} &= \langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} \rangle = \dfrac{1}{V}\displaystyle\int_V \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} dV \\ \underset{\sim}{\boldsymbol{E}} &= \langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{g}} \rangle = \dfrac{1}{V}\displaystyle\int_V \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}} dV \end{cases} \tag{2.19}$$

Les hypothèses les plus simples permettent de définir les bornes dites à l'ordre 0 de **Voigt** et **Reuss**, en supposant respectivement une déformation ou une contrainte uniforme au sein de l'agrégat. On obtient facilement les relations suivantes :

$$\begin{cases} \text{Voigt} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} = \langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} \rangle = \left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{g}} \right\rangle = \left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} \right\rangle : \underset{\sim}{\boldsymbol{E}} \\ \text{Reuss} : \underset{\sim}{\boldsymbol{E}} = \langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{g}} \rangle = \left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{g} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} \right\rangle = \left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{g} \right\rangle : \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} \end{cases} \tag{2.20}$$

Nous pouvons définir un tenseur d'élasticité (resp. des souplesses) effectif $\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff}$ (resp. $\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}$) qui, dans le cas DS possédera une symétrie isotrope transverse, et dont les composantes sont calculables analytiquement. En annexe, une démonstration des relations pour la borne de **Reuss** est proposée. Elle fournit les relations 2.21, dans lesquelles les valeurs affectées d'un indice 0 sont des composantes de la matrice représentant le tenseur des souplesses du grain dans son repère cristallographique (notation de Voigt), les valeurs effectives étant celles du matériau DS dans un repère où l'axe $\vec{x}_3$ est l'axe commun à tous les grains.

$$\begin{cases} S_{11}^{eff} &= S_{11}^{0} - \dfrac{A^0}{8} \\ S_{12}^{eff} &= \frac{3}{4}S_{11}^{0} + \frac{1}{4}S_{12}^{0} - \frac{1}{8}S_{44}^{0} \\ A^0 &= 2(S_{11}^{0} - S_{12}^{0}) - S_{44}^{0} \end{cases} \tag{2.21}$$

D'autres bornes ont été définies, mais elles ne sont pas introduites dans ce travail. Elles font principalement référence aux travaux menés par **Kröner** sur le milieu statistiquement désordonné [Kröner, 1977] ou aux bornes de **Hashin** et **Strickman** pour les microstructures isotropes. En parallèle de ces encadrements du comportement effectif, d'autres schémas permettent une estimation de la réponse effective. En particulier, le schéma auto-cohérent [Hershey, 1954,Kröner, 1961] simplifie le problème du matériau hétérogène en un jeu de problèmes

d'inclusions noyées dans un milieu homogène équivalent (MHE) qui reste à définir. Chaque problème sur le système inclusion/matrice est résolu en utilisant l'approche proposée par **Eshelby** [Eshelby, 1957].

Solution d'Eshelby pour une inclusion ellipsoïdale

Le problème d'inclusion résolu par **Eshelby** est devenu un des fondements de la mécanique des milieux hétérogènes. La résolution initiale se fait pour une matrice et une inclusion de même comportement linéaire élastique et sans chargement sur le milieu (voir la figure 2.12).

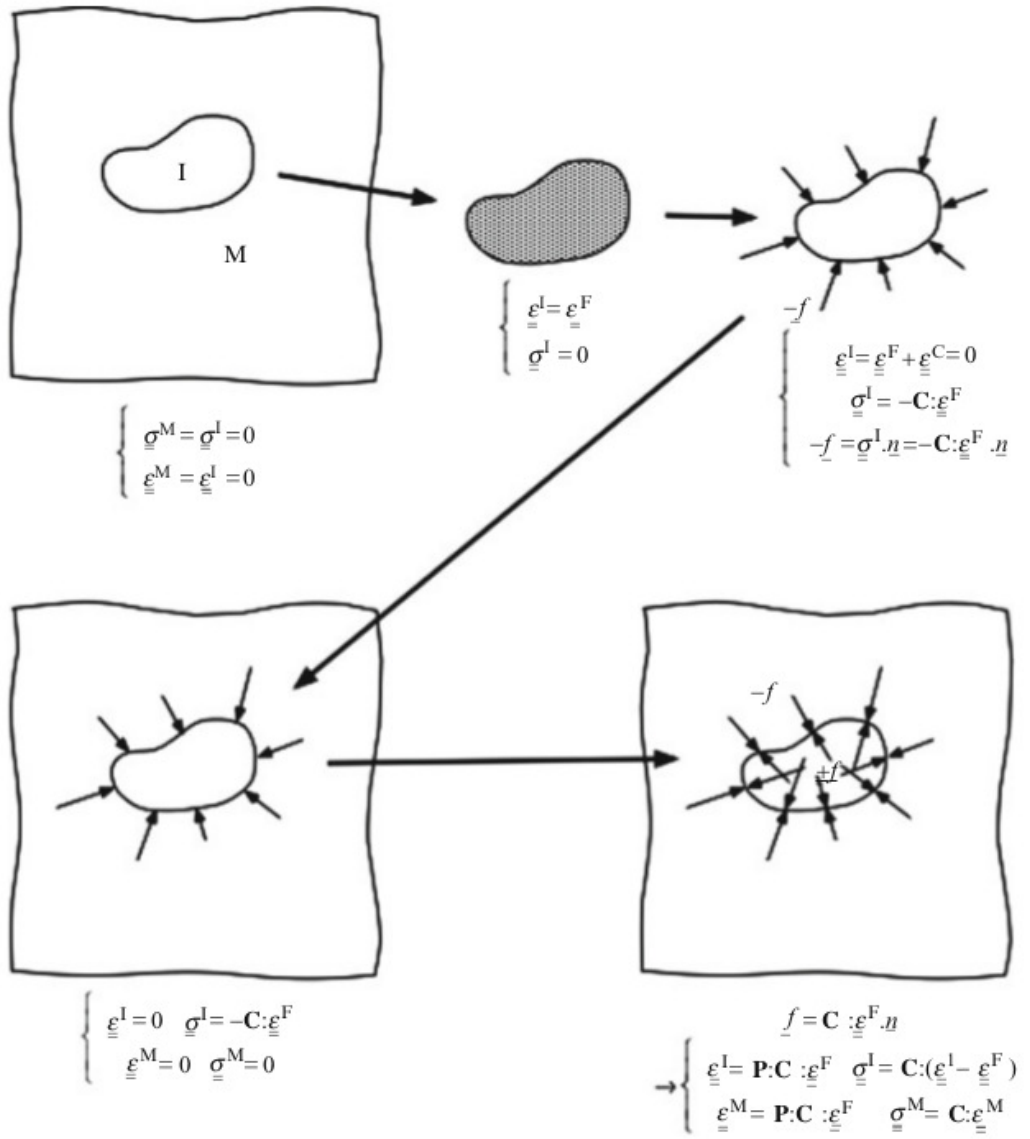


Figure 2.12 – *Les étapes de définition du problème initial d'***Eshelby** *[Eshelby, 1957] : 1. L'inclusion est isolée de la matrice, 2. Une déformation libre de tout effort extérieur est introduite dans l'inclusion, 3. Une contrainte est imposée pour rendre sa forme initiale à l'inclusion, 4. L'inclusion est réintroduite dans la matrice et 5. L'inclusion « peut relâcher » une part de la contrainte générant une force volumique à l'interface $\pm f$ [François et al., 1998].*

Une déformation dite « libre de contrainte », $\underset{\sim}{\varepsilon}^F$, est introduite dans l'inclusion (elle s'apparente à une dilatation thermique ou un changement de phase [François et al., 1998]). L'équilibre à l'interface entre les deux milieux homogènes permet d'exprimer la force surfacique exercée sous la forme :

$$f = \underset{\approx}{\boldsymbol{C}} : \underset{\sim}{\varepsilon}^F : \vec{n} \tag{2.22}$$

où $\vec{n}$ représente le vecteur normal sortant sur l'interface. Nous introduisons le tenseur de **Green** $\boldsymbol{G}(\underline{x}, \underline{x}')$, permettant d'exprimer le déplacement en un point $\underline{x}$ de l'espace pour une force appliquée en un point $\underline{x}'$. Dans le cas d'un milieu infini, la relation peut s'écrire :

$$\vec{u}(\underline{x}) = \int_S \underset{\sim}{\boldsymbol{G}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}} : \underset{\sim}{\varepsilon}^F : \vec{n} dS' \tag{2.23}$$

où la surface S' fait référence à $\underline{x}'$. En faisant quelques hypothèses sur la dérivabilité du tenseur de **Green** par rapport à $\underline{x}'$, une formulation en déformation au sein de l'inclusion peut être écrite sur une intégrale volumique (formule d'**Ostrogradski**) et la dérivée seconde du tenseur de **Green** (par rapport à $\underline{x}'$ puis $\underline{x}$) en :

$$\varepsilon_{ij}(\underline{x}) = \left[\int_I G_{ik,lj}(\underline{x}, \underline{x}') dV' \right] C_{klmn} \varepsilon^F_{mn} \tag{2.24}$$

où les indices l, j sont issus des dérivations successives. **Eshelby** montre alors que la déformation ne dépend plus de la position pour une inclusion ellipsoïdale, ramenant l'équation précédente à :

$$\underset{\sim}{\varepsilon}^I = \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\sim}{\varepsilon}^F \tag{2.25}$$

où $\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}$ représente le tenseur d'**Eshelby**. La contrainte dans l'inclusion s'écrit alors :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^I = \underset{\approx}{\boldsymbol{C}} : (\underset{\sim}{\varepsilon}^I - \underset{\sim}{\varepsilon}^F) \tag{2.26}$$

Pour un problème avec un chargement imposé à l'infini ($\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}/\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}$), l'expression des quantités dans l'inclusion devient :

$$\begin{cases} \underset{\sim}{\varepsilon}^I &= \underset{\sim}{\boldsymbol{E}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\sim}{\varepsilon}^F \\ \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^I &= \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{S}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{I}}) : \underset{\sim}{\varepsilon}^F \end{cases} \tag{2.27}$$

Le dernier problème que nous traiterons est celui d'une inclusion de comportement élastique différent $\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^I$ de celui de la matrice et avec un chargement à l'infini. Pour la résolution, on considère le problème fictif d'une inclusion de même élasticité mais où la déformation libre est différente et s'écrit $\underset{\sim}{\varepsilon}^F_{eq}$. Le problème fictif donne les deux premières équations de 2.28 et la dernière est donnée par le problème réel hétérogène :

$$\begin{cases} \underset{\sim}{\varepsilon}^I &= \underset{\sim}{\boldsymbol{E}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\sim}{\varepsilon}^F_{eq} \\ \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^I &= \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{S}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{I}}) : \underset{\sim}{\varepsilon}^F_{eq} \\ \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^I &= \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^I : (\underset{\sim}{\varepsilon}^I - \underset{\sim}{\varepsilon}^F) \end{cases} \tag{2.28}$$

On cherche alors l'équivalence des deux problèmes, en assurant la cohérence sur les deux expressions de $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^I$. Cela donne une expression pour la déformation libre équivalente :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{S}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{I}}) : \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^F_{eq} = \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^I : (\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^I - \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^F)$$

$$\Leftrightarrow \underset{\approx}{\boldsymbol{C}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{E}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{S}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{I}}) : \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^F_{eq} = \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^I : (\underset{\sim}{\boldsymbol{E}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^F_{eq} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^F)$$

$$\Leftrightarrow \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^F_{eq} = \left[(\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^I - \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}) : \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}\right]^{-1} : \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^I : \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^F - (\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^I - \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}) : \underset{\sim}{\boldsymbol{E}}\right] \tag{2.29}$$

Le premier terme représente une déformation aussi libre de contrainte (puisque elle ne dépend que de $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^L$) et le second terme provient du contraste de comportement entre l'inclusion et la matrice. Enfin, il est coutume de remplacer la déformation libre par la différence des déformations à l'infini et dans l'inclusion selon :

$$\boxed{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^I = \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{-1} - \underset{\approx}{\boldsymbol{I}}) : (\underset{\sim}{\boldsymbol{E}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^I)} \tag{2.30}$$

En utilisant la loi de **Hooke** sur les deux contraintes, on obtient une relation linéaire entre la déformation appliquée à l'infini et la déformation uniforme développée dans l'inclusion :

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{C}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{-1} : \underset{\sim}{\boldsymbol{E}} = \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^I + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{-1} - \underset{\approx}{\boldsymbol{I}})\right] : \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^I \tag{2.31}$$

$$\text{en définissant } \underset{\approx}{\boldsymbol{A}}^I = \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{-1} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^I)\right]^{-1}$$

D'où

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^I = \underset{\approx}{\boldsymbol{A}}^I_E : \underset{\sim}{\boldsymbol{E}} \tag{2.32}$$

$\underset{\approx}{\boldsymbol{A}}^I$ est le « tenseur de localisation » qui permet de passer de la déformation macroscopique à la déformation dans la phase I pour un comportement purement élastique. A ce stade, il ne reste plus qu'à spécifier la forme du tenseur d'Eshelby $\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}$. En règle générale, son évaluation nécessite une intégration numérique. Toutefois, il existe une solution analytique dans de nombreux cas particulier, comme le cas d'une inclusion sphérique dans un MHE isotrope qui est largement utilisé dans la littérature. Notamment, le cas d'une inclusion cylindrique noyée dans un MHE de symétrie isotrope transverse d'axe x_3 est traité dans [Suvorov and Dvorak, 2002]. Dans un repère d'axes (x_1,x_2,x_3), le tenseur s'exprime par la matrice :

inclusion sphérique dans un MHE isotrope :

$$[S] = \begin{pmatrix} S_{1111} & S_{1122} & S_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ S_{1122} & S_{1111} & S_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ S_{1122} & S_{1122} & S_{1111} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{1212} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{1212} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{1212} \end{pmatrix} \qquad \begin{cases} S_{1111} = \dfrac{5-7\nu}{15(1-\nu)} \\ S_{1122} = \dfrac{5\nu-1}{15(1-\nu)} \\ S_{1212} = \dfrac{4-5\nu}{15(1-\nu)} \end{cases}$$

inclusion cylindrique dans un MHE isotrope transverse :

$$[S] = \begin{pmatrix} S_{1111} & S_{1122} & S_{2233} & 0 & 0 & 0 \\ S_{1122} & S_{1111} & S_{2233} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{2323} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{2323} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{1212} \end{pmatrix} \quad \begin{cases} S_{1111} = \dfrac{5C_{11}+C_{12}}{8C_{11}} \\ S_{1122} = \dfrac{C_{11}-3C_{12}}{8C_{11}} \\ S_{2233} = \dfrac{C_{23}}{2C_{11}} \\ S_{1212} = \dfrac{3C_{11}-C_{12}}{8C_{11}} \\ S_{2323} = \dfrac{1}{4} \end{cases}$$

Si une formule analytique ne peut être obtenue, il faut écrire le problème mécanique sous forme intégrale où la déformation libre génère une force volumique. Nous ne détaillerons pas les calculs qui sont déjà largement présents dans la littérature [Faivre, 1971, Mura, 1987]. Dans ce travail, nous avons utilisé le script écrit sous Zset durant la thèse de **Martin** qui consiste à calculer [Martin, 2012] :

$$\begin{aligned} S_{ijmn} &= \frac{1}{8\pi} C_{pqmn} \int_{-1}^{1} \int_{0}^{2\pi} \frac{\xi_j \xi_q N_{ip} + \xi_i \xi_q N_{jp}}{D} d\theta d\zeta_3 \\ K_{ik} &= C_{ijkl} \xi_j \xi_l \\ D &= \epsilon_{mnl} K_{m1} K_{n2} K_{l3} \\ N_{ij} &= \frac{\epsilon_{ikl} \epsilon_{jmn}}{2} K_{km} K_{ln} \end{aligned} \tag{2.33}$$

où ϵ est le symbole de Levi-Civita et où le vecteur d'onde de la transformée de Fourier $\vec{\xi}$ est exprimé dans le repère $(0,\zeta_3,\theta)$ par :

$$\begin{aligned} \xi_1 &= \frac{\sqrt{1-\zeta_3^2}}{a} cos(\theta) \\ \xi_2 &= \frac{\sqrt{1-\zeta_3^2}}{b} sin(\theta) \\ \xi_3 &= \frac{\zeta_3}{c} \end{aligned}$$

où (a,b,c) sont les rayons de l'ellipsoïde. La double intégrale est résolue numériquement à l'aide de la méthode de quadrature de **Gauss-Legendre**.

Utilisation du schéma auto-cohérent

Nous avons établi précédemment des relations liant la déformation au sein de l'inclusion à celle imposée uniformément à l'infini. De nombreux choix sont possibles pour définir le tenseur d'élasticité du MHE (la matrice dans le problème d'inclusion précédent). La solution à adopter dépend de l'hétérogénéité du milieu. Ainsi, dans le cas de matériaux composites présentant des inclusions diluées dans une matrice, l'approche de **Mori-Tanaka** affecte les propriétés de la matrice au MHE (valable pour un taux de fibres inférieur ou égal à $40\,\%$). Le

schéma auto-cohérent quant à lui, s'applique idéalement aux milieux parfaitement désordonnés. Il va chercher à construire ce milieu environnant à partir des contributions pondérées de chacune des phases. On peut écrire :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{g} = \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} : \underset{\approx}{\boldsymbol{A}}^{g}_{E} : \underset{\sim}{\boldsymbol{E}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} : \underset{\approx}{\boldsymbol{A}}^{g}_{E} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff^{-1}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}$$

Nous définissons le tenseur d'accommodation $\underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g} = \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} : \underset{\approx}{\boldsymbol{A}}^{g}_{E} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff^{-1}}$ qui relie la contrainte locale à la contrainte macroscopique. Ce tenseur possède également la propriété $\left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g} \right\rangle = \underset{\approx}{\boldsymbol{I}}$. Nous trouvons une expression pour le tenseur d'élasticité effectif suivant :

$$\boxed{\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} = \left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} : \underset{\approx}{\boldsymbol{A}}^{g}_{E} \right\rangle} \tag{2.34}$$

On obtient ainsi une relation implicite caractérisant le tenseur d'élasticité effectif. Le problème peut être résolu simplement par une méthode itérative initialisée en utilisant la borne de Voigt de telle sorte que pour l'itération n, l'équation s'écrit comme une somme sur les phases g dépendant du tenseur d'**Eshelby** $\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}(n-1)$ et du tenseur d'élasticité effectif $\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff}(n-1)$ à l'itération $(n-1)$:

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff}(n) = \sum_{g} f_g \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} : \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}(n-1) : (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff^{-1}}(n-1) : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g}) \right]^{-1} \tag{2.35}$$

Le tableau 2.1 fournit une comparaison des valeurs obtenues avec les méthodes d'homogénéisation et les calculs en champ complet sur les composantes du tenseur d'élasticité effectif pour un matériau DS d'axe x_3, avec les valeurs suivantes caractérisant l'élasticité du grain cubique dans le repère cristallographique :

$$\begin{cases} C_{3333} = 203\,756\,\mathrm{MPa} \\ C_{2233} = 125\,490\,\mathrm{MPa} \\ C_{2323} = 112\,000\,\mathrm{MPa} \end{cases}$$

La comparaison est faite en utilisant 100 réalisations d'un calcul en champ complet avec la représentation « Voro-N » de l'agrégat (voir la partie 2.1).

	C_{1111} [MPa]	Relative error [%]	C_{1122} [MPa]	Relative error [%]
Full field (Voro-N)	228 990	-	100 248	-
Voigt	240 190	4.89	89 054	11.17
Reuss	222 624	2.78	106 619	5.98
Self-Consistent	227 793	0.52	101 451	1.20

Table 2.1 – *Comparatif des valeurs pour les composantes transverses du tenseur d'élasticité et de l'erreur relative vis-à-vis des résultats en champ complet pour le cas Voro-N.*

La précision obtenue avec le modèle auto-cohérent est comparable à celle trouvée entre les trois types d'agrégat. Cela confirme que les trois représentations différentes en champ complet du problème convergent vers des composantes effectives représentatives. Les bornes sont

quant à elles éloignées des calculs de référence par éléments finis, en particulier pour la borne de Voigt.

D'autre part, des essais par méthode résonante sur le DS200 ont été réalisés par **Gadaud** à l'institut Pprime dans le cadre de cette thèse [Gadaud, 2015]. Différentes poutres de dimensions ($25\,\text{mm}\times4\,\text{mm}\times2\,\text{mm}$) ont été prélevées pour plusieurs angles θ entre les directions longitudinale et transverse (voir le schéma de la figure 2.13). Les échantillons sont testés sous une sollicitation de flexion avec un balayage en fréquence afin de trouver la fréquence de résonance. Le module apparent se trouve à l'aide de la formule :

$$E = 0.9464\rho {F_F}^2 \frac{L^4}{B^2} T \tag{2.36}$$

où ρ est la masse volumique, F_F la fréquence de résonance en flexion, L la longueur de l'échantillon, B son épaisseur et T un facteur correctif proche de 1. La figure 2.13 montre l'évolution obtenue pour le module apparent en traction en fonction de l'angle entre l'axe longitudinal du matériau et la direction de sollicitation. Les valeurs expérimentales ont été reportées et montrent une bonne corrélation avec le modèle auto-cohérent, même si la dispersion à 60 ° est du même ordre que l'écart avec la borne inférieure.

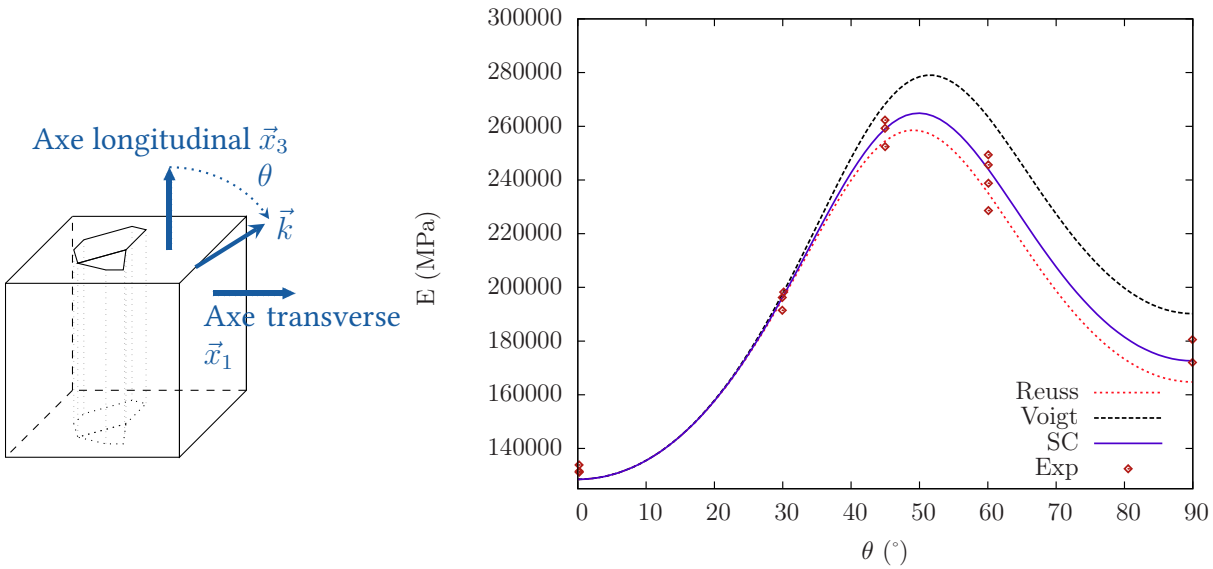


Figure 2.13 – *Evolution du module apparent de traction simple en fonction de l'angle de chargement θ pour les différentes méthodes d'homogénéisation et les mesures effectuées sur DS200 à 20 °C. On donne C_{3333} = 225 400 MPa, C_{2233} =131 500 MPa et C_{2323} = 131 600 MPa.*

Avec un tenseur des contraintes $\underset{\sim}{\Sigma}$ défini pour une traction simple d'intensité T et un allongement D dans la direction $\vec{k}$, la relation d'élasticité s'exprime :

$$D = (\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff} : \underset{\sim}{\Sigma}) : (\vec{k} \otimes \vec{k})$$

$$\Leftrightarrow D = \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff} : T(\vec{k} \otimes \vec{k})\right] : (\vec{k} \otimes \vec{k})$$

$$\Leftrightarrow D = T S^{eff}_{ijkl} k_i k_j k_k k_l \tag{2.37}$$

où $\vec{k} = \begin{pmatrix} sin(\theta) \\ 0 \\ cos(\theta) \end{pmatrix}$ (rotation autour de l'axe $\vec{x}_2$). Le rapport de T sur D représente par définition le module d'Young apparent E dans la direction $\vec{k}$:

$$\frac{1}{E} = S^{eff}_{ijmn} k_i k_j k_m k_n \text{ avec } i,j,m,n \in [1,3] \tag{2.38}$$

Estimation des fluctuations élastiques

Nous avons vu lors des calculs en champ complet que même pour le cas du comportement élastique, on observait une fluctuation intra-granulaire. C'est pourquoi des estimateurs plus complexes peuvent être définis, donnant une indication sur la variance « par phase ». Celle-ci va se construire sur une différence entre deux quantités, la valeur moyenne au sein de chaque phase (donnée précédemment) et la moyenne du second moment de la variable étudiée. Sous forme tensorielle, le tenseur de covariance s'écrit :

$$\boxed{\underset{\approx}{\mathscr{V}}^g_{\sigma} = \langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \otimes \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \rangle^g - \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} \otimes \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}}} \tag{2.39}$$

Une expression du second moment du tenseur des contraintes local $\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \otimes \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \rangle^g$ peut s'écrire (e.g. voir le chapitre 13 du livre de **Buryachenko** [Buryachenko, 2007]) :

$$\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \otimes \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \rangle^g = \frac{1}{f^g} \frac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{g}} :: (\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} \otimes \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}) \tag{2.40}$$

On s'aventure donc maintenant dans le calcul de cette dérivée, seule vraie difficulté dans l'estimation de cette fluctuation. Celle-ci provient de l'expression implicite de $\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}$ mais aussi de la dépendance au tenseur d'**Eshelby** qu'il va falloir dériver. Cette opération requiert le traitement d'un tenseur d'ordre 8 en dimension 3 ($i.e.$ 6561 composantes dans le cas général et 1296 dans le cas symétrique). La résolution qui est faite est basée sur les explications proposées dans l'annexe de [Lebensohn et al., 2011], adaptée au cas purement élastique, avec une différence sur le calcul de la dérivée du tenseur d'**Eshelby**. Pour commencer, il est nécessaire de réécrire la relation de localisation 2.30 en déformation en faisant apparaître le tenseur des souplesses effectif $\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}$:

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{g}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{E}} + (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}})^{-1} : \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff} : (\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}}) \tag{2.41}$$

On notera par la suite $\bar{\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}} = (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}})^{-1} : \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}$. On trouve alors un tenseur d'accommodation $\underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^g$ exprimé à l'aide des souplesses élastiques :

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^g = (\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^g + \bar{\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}})^{-1} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff} + \bar{\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}}) \tag{2.42}$$

On montre alors facilement que le tenseur des souplesses élastiques effectifs s'écrit :

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff} = \left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^g : \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^g \right\rangle \tag{2.43}$$

La dérivée précédente fait donc intervenir la dérivée du produit ci-dessus donnant :

$$\frac{\partial S^{eff}_{ij}}{\partial S^g_{uv}} = \sum_r f^r \left(\frac{\partial S^r_{ik}}{\partial S^g_{uv}} B^r_{kj} + S^r_{ik} \frac{\partial B^r_{kj}}{\partial S^g_{uv}} \right) \tag{2.44}$$

où δ est le symbole de **Kronecker** et $\{i,j,k,u,v\} \in [1,6]$. Avant de développer l'expression de la dérivée dans le terme de droite, des calculs préliminaires sont nécessaires. Le tenseur d'accommodation $\underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^g$ dépend, dans l'expression 2.42, de $\underset{\approx}{\bar{\boldsymbol{S}}}$ qui introduit le tenseur d'**Eshelby**. Une première étape consiste donc à exprimer :

$$\frac{\partial S_{ij}}{\partial S^g_{uv}} = \frac{\partial S_{ij}}{\partial S^{eff}_{kl}} \frac{\partial S^{eff}_{kl}}{\partial S^g_{uv}} \tag{2.45}$$

Le calcul de la dérivée du tenseur d'**Eshelby** par rapport au tenseur des souplesse effectif se fait pour chaque composante de ce dernier (pas de notation de **Voigt**) en écrivant :

$$\left[\frac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}\right]^{k,l}_{mnop} = \left[\frac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{T}}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}\right]^{k,l}_{mnqr} C^{eff}_{qrop} + T_{mnqr}\left[\frac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}\right]^{k,l}_{qrop} \tag{2.46}$$

où $\{k,l\} \in [1,6]$ et $\{m,n,o,p,q,r\} \in [1,3]$. En reprenant l'expression du tenseur d'**Eshelby** proposée en 2.34, on trouve pour le tenseur $\underset{\approx}{\boldsymbol{T}}$ (appelé aussi tenseur de polarisation de **Hill**) :

$$\begin{aligned}\left[\frac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{T}}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}\right]^{k,l}_{mnqr} &= \frac{1}{8\pi}\int_{-1}^{1}\int_{0}^{2\pi}(\xi_n\xi_q\frac{\partial N_{mq}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}} + \xi_m\xi_r\frac{\partial N_{nq}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}})\frac{1}{D} + \dots \\ &\dots + (\xi_n\xi_r N_{mq} + \xi_m\xi_r N_{nq})\frac{\partial D^{-1}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}} d\theta d\zeta_3\end{aligned} \tag{2.47}$$

$$\frac{\partial N_{mn}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}} = \frac{\epsilon_{mop}\epsilon_{nqr}}{2}\left[\frac{\partial K_{oq}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}K_{pr} + K_{oq}\frac{\partial K_{pr}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}\right]$$

$$\left[\frac{\partial K_{mn}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}\right]^{k,l} = \left[\frac{\partial C^{eff}}{\partial S^{eff}_{kl}}\right]_{monp}\xi_o\xi_p$$

$$\frac{\partial D^{-1}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}} = -\frac{1}{D^2}\epsilon_{mno}\left[\frac{\partial K_{m1}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}K_{n2}K_{o3} + K_{m1}\frac{\partial K_{n2}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}K_{o3} + K_{m1}K_{n2}\frac{\partial K_{o3}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}\right]$$

$$\frac{\partial C^{eff}_{ij}}{\partial S^{eff}_{kl}} = \frac{1}{2}(C^{eff}_{ik}C^{eff}_{lj} + C^{eff}_{il}C^{eff}_{kj})$$

Comme pour le calcul du tenseur d'**Eshelby**, la dérivée du tenseur de polarisation est intégrée numériquement à l'aide d'une quadrature de **Gauss**. Une fois le calcul réalisé pour toutes les composantes $k,\ l$ du tenseur des souplesses effectif, on peut développer la dérivée de $\underset{\approx}{\bar{\boldsymbol{S}}}$ selon :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \underset{\approx}{\bar{\boldsymbol{S}}}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^g} &= (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}})^{-1} : \frac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}\frac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^g} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}})^{-1} : \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff} + \dots \\ &\dots + (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}})^{-1} : \frac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}\frac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^g} : \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff} + (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}})^{-1} : \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \frac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^g}\end{aligned} \tag{2.48}$$

Posons alors :

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{F}}^{\boldsymbol{S}} = (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}})^{-1} : \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}$$

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{\Psi}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{F}}^{\boldsymbol{S}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff} + \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}$$

L'équation 2.48 s'écrit maintenant :

$$\frac{\partial \underset{\approx}{\bar{\boldsymbol{S}}}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{g}} = (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}})^{-1} : \frac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}} \frac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{g}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{\Psi}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{F}}^{\boldsymbol{S}} : \frac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{g}} \tag{2.49}$$

Le terme $\dfrac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{g}}$ ne peut pas être factorisé directement dans les deux termes de droite. En notation indicielle, l'équation 2.49 devient :

$$\frac{\partial \bar{S}_{ij}}{\partial S^{g}_{kl}} = (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}})^{-1}_{iu} \frac{\partial S_{uv}}{\partial S^{eff}_{pq}} \frac{\partial S^{eff}_{pq}}{\partial S^{g}_{kl}} \Psi_{vj} + F^{S}_{ip} \frac{\partial S^{eff}_{pj}}{\partial S^{g}_{kl}} \tag{2.50}$$

La factorisation du terme en $\dfrac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{g}}$ est alors possible selon :

$$\frac{\partial \bar{S}_{ij}}{\partial S^{g}_{kl}} = \left((\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}})^{-1}_{iu} \frac{\partial S_{uv}}{\partial S^{eff}_{pq}} \Psi_{vj} + F^{S}_{ip} \delta_{jq} \right) \frac{\partial S^{eff}_{pq}}{\partial S^{g}_{kl}} = \theta_{ijpq} \frac{\partial S^{eff}_{pq}}{\partial S^{g}_{kl}} \tag{2.51}$$

avec

$$\theta_{ijpq} = (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}})^{-1}_{iu} \frac{\partial S_{uv}}{\partial S^{eff}_{pq}} \Psi_{vj} + F^{S}_{ip} \delta_{jq}$$

Enfin, nous pouvons développer la dérivée du tenseur d'accommodation par rapport au tenseur local des souplesses :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{r}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{g}} \quad = \quad & -(\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{r} + \underset{\approx}{\bar{\boldsymbol{S}}})^{-1} : \left[\frac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{r}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{g}} + \frac{\partial \underset{\approx}{\bar{\boldsymbol{S}}}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{g}} \right] : (\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{r} + \underset{\approx}{\bar{\boldsymbol{S}}})^{-1} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff} + \underset{\approx}{\bar{\boldsymbol{S}}}) + \ldots \\ \ldots \quad & +(\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{r} + \underset{\approx}{\bar{\boldsymbol{S}}})^{-1} : \left[\frac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{g}} + \frac{\partial \underset{\approx}{\bar{\boldsymbol{S}}}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{g}} \right] \end{aligned} \tag{2.52}$$

En notant

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{\chi}}^{r} = (\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{r} + \underset{\approx}{\bar{\boldsymbol{S}}})^{-1}$$

la relation 2.52 s'écrit également :

$$\frac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{r}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{g}} = -\underset{\approx}{\boldsymbol{\chi}}^{r} : \frac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{r}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{g}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{r} + \underset{\approx}{\boldsymbol{\chi}}^{r} : \frac{\partial \underset{\approx}{\bar{\boldsymbol{S}}}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{g}} : \left(\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{r} \right) + \underset{\approx}{\boldsymbol{\chi}}^{r} : \frac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{g}} \tag{2.53}$$

Pour le développement du premier terme, il est important de prendre en compte la symétrie des deux tenseurs $\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{g}$ et $\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{r}$ qui signifie que la dérivée sera non nulle lorsqu'on dérivera la composante située à la même ligne et à la même colonne que la composante de $\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{g}$ et également

pour la composante située à la ligne de même valeur que la colonne de $\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^g$ et d'indice sur la colonne équivalent à celui de la ligne pour $\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^g$. Ainsi, l'équation 2.53 peut s'écrire en notation indicielle :

$$\frac{\partial B^r_{kj}}{\partial S^g_{uv}} = -\chi^r_{km}\frac{1}{2}(\delta_{mu}\delta_{nv}\delta_{rg} + \delta_{nu}\delta_{mv}\delta_{rg})B^r_{nj} + \chi^r_{km}\frac{\partial \bar{S}_{mn}}{\partial S^g_{uv}}\left(\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^r\right)_{nj} + \chi^r_{km}\frac{\partial S^{eff}_{mj}}{\partial S^g_{uv}} \tag{2.54}$$

En utilisant la linéarisation de 2.51, on trouve :

$$\frac{\partial B^r_{kj}}{\partial S^g_{uv}} = -\frac{1}{2}(\chi^r_{ku}B^r_{vj}\delta_{rg} + \chi^r_{kv}B^r_{uj}\delta_{rg}) + \chi^r_{km}\theta_{mnqp}\frac{\partial S^{eff}_{pq}}{\partial S^g_{uv}}\left(\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^r\right)_{nj} + \chi^r_{km}\frac{\partial S^{eff}_{mj}}{\partial S^g_{uv}}$$

$$\frac{\partial B^r_{kj}}{\partial S^g_{uv}} = -\frac{1}{2}(\chi^r_{ku}B^r_{vj}\delta_{rg} + \chi^r_{kv}B^r_{uj}\delta_{rg}) + \left(\chi^r_{km}\theta_{mnpq}\left(\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^r\right)_{nj} + \chi^r_{km}\delta_{mp}\delta_{jq}\right)\frac{\partial S^{eff}_{pq}}{\partial S^g_{uv}}$$

$$\frac{\partial B^r_{kj}}{\partial S^g_{uv}} = -\frac{1}{2}(\chi^r_{ku}\delta_{gr}B^r_{vj} + \chi^r_{kv}\delta_{gr}B^r_{uj}) + \chi^r_{km}\alpha^r_{mjpq}\frac{\partial S^{eff}_{pq}}{\partial S^g_{uv}} \tag{2.55}$$

avec

$$\alpha^r_{mjpq} = \theta_{mnpq}(\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^r)_{nj} + \delta_{mp}\delta_{jq}$$

En introduisant l'expression 2.55 dans la relation 2.44, nous arrivons à une première expression :

$$\begin{aligned}\frac{\partial S^{eff}_{ij}}{\partial S^g_{uv}} &= \sum_r f^r\left(\frac{1}{2}(\delta_{iu}\delta_{kv}\delta_{rg} + \delta_{ku}\delta_{iv}\delta_{rg})B^r_{kj} - S^r_{ik}\frac{1}{2}(\chi^r_{ku}\delta_{gr}B^r_{vj} + \ldots\right.\\ \ldots &+ \left.\chi^r_{kv}\delta_{gr}B^r_{uj}) + S^r_{ik}\chi^r_{km}\alpha^r_{mjpq}\frac{\partial S^{eff}_{pq}}{\partial S^g_{uv}}\right)\end{aligned} \tag{2.56}$$

Pour alléger les notations, les auteurs de [Lebensohn et al., 2011] introduisent :

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{\beta}}^r = \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^r : \underset{\approx}{\boldsymbol{\chi}}^r$$

En factorisant les deux termes contenant $\dfrac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^g}$, l'expression 2.56 devient :

$$\begin{aligned}(\delta_{ip}\delta_{jq} - \sum_r f^r\beta^r_{im}\alpha^r_{mjpq})\frac{\partial S^{eff}_{pq}}{\partial S^g_{uv}} &= \sum_r f^r\left(\frac{1}{2}(\delta_{iu}\delta_{rg}B^r_{vj} + \delta_{iv}\delta_{rg}B^r_{uj}) - \ldots\right.\\ \ldots &- \left.\tfrac{1}{2}(\beta^r_{iu}\delta_{gr}B^r_{vj} + \beta^r_{iv}\delta_{gr}B^r_{uj})\right)\end{aligned}$$

$$(\delta_{ip}\delta_{jq} - \sum_r f^r\beta^r_{im}\alpha^r_{mjpq})\frac{\partial S^{eff}_{pq}}{\partial S^g_{uv}} = \frac{f^g}{2}\left((\delta_{iu} - \beta^g_{iu})\,B^g_{vj} + (\delta_{iv} - \beta^r_{iv})\,B^g_{uj}\right) \tag{2.57}$$

Le calcul de la dérivée du tenseur des souplesses effectifs est ramené à la résolution d'un système linéaire à 36 équations qui s'écrit :

$$\boxed{\Omega_{ijpq}\frac{\partial S^{eff}_{pq}}{\partial S^g_{uv}} = \kappa^{g,uv}_{ij}} \tag{2.58}$$

avec

$$\kappa_{ij}^{g,uv} = \frac{f^g}{2}\left((\delta_{iu} - \beta_{iu}^g)B_{vj}^g + (\delta_{iv} - \beta_{iv}^g)B_{uj}^g\right)$$

$$\Omega_{ijpq} = \delta_{ip}\delta_{jq} - \sum_r f^r \beta_{im}^r \alpha_{mjpq}^r$$

Notons A la matrice associée au tenseur Ω_{ijpq} dont les composantes sont notées $A(6i+j, 6p+q)$, B la matrice colonne associée à $\dfrac{\partial S_{pq}^{eff}}{\partial S_{uv}^g}$ pour u, v fixés dont les composantes sont notées $B(1, 6p+q)$ et C la matrice colonne associée à κ_{ij} dont les composantes sont notées $C(1, 6i+j)$. Alors, la résolution du système linéaire est réalisée en diagonalisant la matrice A par une élimination de **Gauss** pour chaque valeur de u et v. On reconstruit de manière itérative le tenseur $\dfrac{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{eff}}{\partial \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^g}$. Outre la complexité des objets manipulés (tenseurs d'ordre 8), le principal problème est le manque de repère intermédiaire permettant de valider les différentes étapes d'un calcul. Les tenseurs calculés n'ayant pas de signification physique, il est difficile de juger des valeurs générées.

Afin de valider le code pour un matériau DS, on vérifie tout d'abord que la variance est nulle pour une traction simple dans l'axe $\vec{x}_3$. La figure 2.14 compare la variance sur la contrainte σ_{11} pour une traction simple $\Sigma_{11} = 36$ MPa en utilisant le cas en champ complet Grid et Voro-N. Le comportement est supposé linéaire élastique avec les valeurs obtenues pour le DS200 à 650 °C.

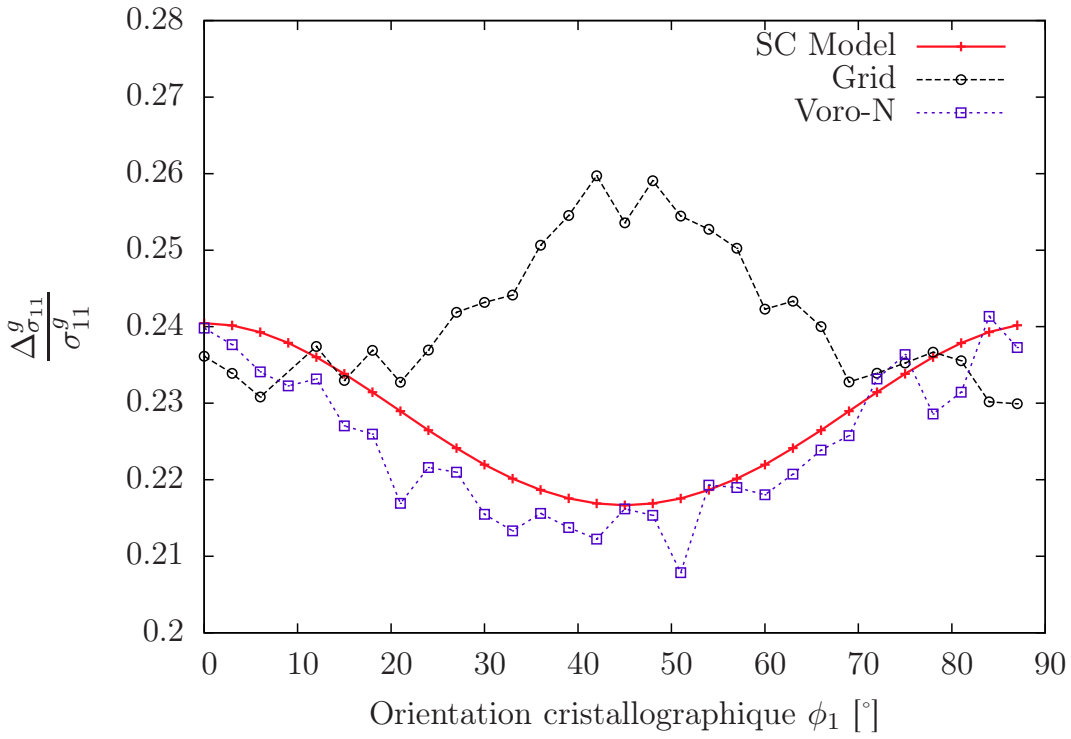


Figure 2.14 – *Ecart-type "par phase" de la contrainte σ_{11} pour une traction simple $\Sigma_{11} = 36$ MPa normé par la contrainte moyenne $\langle\sigma_{11}\rangle^g$ en fonction de l'angle d'Euler ϕ_1. Comparaison du modèle auto-cohérent au second ordre avec 100 réalisations en champ complet pour le cas Voro-N et Grid.*

On observe une bonne corrélation du modèle par rapport aux résultats du cas Voro-N. On pouvait facilement imaginer que le cas Grid introduirait un biais sur les fluctuations locales en raison de la géométrie "carré" des grains. L'écart est particulièrement sensible pour les orientations cristallographiques voisines de $45°$, pour lesquelles le maillage introduit un durcissement artificiel.

2.3.2 Extensions courantes du schéma auto-cohérent à la plasticité

Mentionnons en premier lieu les travaux menés par **Taylor** sur la déformation plastique des métaux [Taylor, 1938]. L'auteur propose de considérer la déformation plastique comme homogène au sein du polycristal (c'est une extension de la borne de **Voigt** pour la plasticité dans laquelle la déformation élastique est négligée face à la déformation plastique). A l'inverse, on parle de modèle statique pour l'extension de la borne de **Reuss** à un comportement EVP. Le modèle de **Taylor** a été modifié par **Lin** [Lin, 1957], qui a introduit l'hypothèse d'uniformité sur la déformation totale. La relation qui découle de ces travaux s'écrit :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + 2\mu(\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^{p} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{gp}}) \tag{2.59}$$

Néanmoins, les modèles de **Taylor** comme de **Lin** sont construits sur des hypothèses qui tendent à surestimer la contrainte macroscopique. Les premiers travaux cherchant à adapter le schéma auto-cohérent à la plasticité sont rassemblés dans [Kröner, 1961] et [Budianski and Wu, 1962] sous le modèle dit KBW (l'initiale des trois auteurs). La relation de transition d'échelle dans le cas élastique est étendue à une déformation irréversible sans ajout/modification. Concrètement, cela revient à considérer que le MHE reste linéaire élastique. Partant de :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{-1} - \underset{\approx}{\boldsymbol{I}}) : (\underset{\sim}{\boldsymbol{E}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{g}}) \tag{2.60}$$

une décomposition additive de la déformation totale en deux parties, élastique et plastique, permet de faire apparaître uniquement les parties irréversibles globale et locale selon :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{-1} - \underset{\approx}{\boldsymbol{I}}) : (\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^{vp} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff^{-1}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{gp}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g^{-1}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}}) \tag{2.61}$$

L'expression précédente se formule aussi :

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff^{-1}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff^{-1}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}) : (\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^{vp} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff^{-1}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{gp}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g^{-1}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}}) \tag{2.62}$$

En factorisant les différents termes, on trouve :

$$\left[\underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff^{-1}} + (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}) : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g^{-1}}\right] : \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff^{-1}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}) : (\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^{vp} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{gp}}) \tag{2.63}$$

Finalement, la relation de localisation devient :

$$\boxed{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} : \left[\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}) : (\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^{vp} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{gp}})\right]} \tag{2.64}$$

où $\underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} = \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} : \underset{\approx}{\boldsymbol{A}}^{g}_{E} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff^{-1}}$ est le tenseur de localisation élastique en contrainte. Le modèle a été popularisé sur des alliages non texturés sous l'hypothèse d'uniformité du comportement élastique $\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} = \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} = 3k\underset{\approx}{\boldsymbol{K}} + 2\mu\underset{\approx}{\boldsymbol{J}}$ pour un tenseur d'élasticité local supposé isotrope. De la même manière, le tenseur d'Eshelby peut être décomposé en une partie sphérique $\alpha\underset{\approx}{\boldsymbol{K}}$ et

une partie déviatorique $\beta \underset{\approx}{\boldsymbol{J}}$. Sous l'hypothèse d'un milieu incompressible, la relation 2.64 se simplifie en :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + 2\mu(1-\beta)(\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^{p} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{gp}}) \tag{2.65}$$

Pour $\nu = 0.33$, on trouve une valeur de β proche de $0,5$. La pente d'accommodation de **Lin-Taylor** de 2μ est alors assouplie en μ. Cette hypothèse d'un MHE linéaire élastique est largement commentée et critiquée (e.g. dans [Berveiller and Zaoui, 1979, Zaoui, 1997, Zaoui and Masson, 2000]). Elle conduit vers des estimations trop élevées de la contrainte macroscopique. Lorsque le matériau se déforme plastiquement, les interactions entre grains s'assouplissent aussi.

Modèle de Hill

Hill propose une résolution du problème d'homogénéisation dans le cadre théorique de la plasticité indépendante du temps [Hill, 1965]. Dans cette partie, nous développerons les équations dans le cas où, à l'échelle locale, le modèle de **Méric** et **Cailletaud** est utilisé. Le taux de cission résolue sur un système de glissement α s'écrit :

$$\dot{\tau}^{\alpha} = \underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^{\alpha} : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{\mathrm{g}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^{\alpha} : [\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\mathrm{g}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} : \sum_{\beta} \dot{\gamma}^{\beta} : \underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^{\beta}] \tag{2.66}$$

La condition sur l'écoulement plastique impose $\dot{f}^{\alpha} = (\dot{\tau}^{\alpha} - \dot{x}^{\alpha})\eta^{\alpha} - \dot{r}^{\alpha} = 0$ où $\eta^{\alpha} = sign(\tau^{\alpha} - x^{\alpha})$. Cela génère une seconde relation pour le taux de cission résolue (avec écrouissage cinématique et isotrope) :

$$\sum_{\beta}[(c\eta^{\beta} - \frac{d}{c}x^{\beta})\delta_{\beta\alpha} + bQH_{\beta\alpha}e^{-bv^{\beta}}]\dot{v}^{\beta} = \dot{\tau}^{\alpha}\eta^{\alpha}$$

$$\Leftrightarrow \quad \sum_{\beta} K_{\beta\alpha}\dot{v}^{\beta} = \dot{\tau}^{\alpha}\eta^{\alpha} \tag{2.67}$$

En combinant les équations 2.67 et 2.66, on trouve :

$$\sum_{\beta}[K_{\beta\alpha} + \underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^{\alpha} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} : \underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^{\beta}\eta^{\alpha}\eta^{\beta}]\dot{v}^{\alpha} = \eta^{\alpha}\underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^{\alpha} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\mathrm{g}} \tag{2.68}$$

Finalement, on peut extraire une relation linéaire entre le taux de déformation totale du grain et le taux de contrainte du grain, selon :

$$\left\{\begin{array}{rcl} \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{\mathrm{g}} & = & \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{g} : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\mathrm{g}} \\ \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{g} & = & \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} : \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \sum_{\alpha}\left\{\sum_{\beta}(K_{\beta\alpha} + \eta^{\beta}\eta^{\alpha}\underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^{\beta} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} : \underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^{\alpha})^{-1}(\eta^{\beta}\eta^{\alpha}\underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^{\beta} : \underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^{\alpha} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g})\right\}\right] \end{array}\right. \tag{2.69}$$

En raison de l'aspect linéaire de la relation entre déformation totale et contrainte, **Hill** étend la méthode de résolution du problème d'inclusion à l'élasto-plasticité en définissant un taux de déformation libre de contrainte. La montée d'échelle s'exprime avec des dérivées à l'ordre un en temps sur la contrainte et la déformation, devenant :

$$\boxed{\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{\mathrm{g}} = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{-1} - \underset{\approx}{\boldsymbol{I}}) : (\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}} - \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\mathrm{g}})} \tag{2.70}$$

Le tenseur d'Eshelby ne dépend plus du tenseur d'élasticité effectif mais de manière plus générale du tenseur tangent élasto-plastique $\underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff}$. Le modèle se présente sous une forme en vitesse où la résolution comporte plusieurs étapes :

- estimation d'un premier taux de contrainte à partir du $\underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff}$ précédent ;
- actualisation des variables plastiques ;
- calcul d'un nouveau jeu d'opérateurs tangents locaux $\underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{g}$;
- itérations sur le calcul de $\underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff}$;
- test du critère de convergence et bouclage éventuel.

Comme la plasticité cristalline est utilisée dans le cadre indépendant du temps, il est important de mentionner que les problèmes dans le choix des systèmes actifs sur les points singuliers vont affecter le tenseur tangent local. Dans [Yoshida et al., 2009], les auteurs proposent d'utiliser le modèle de **Hill** avec un critère de **Schmid** régularisé par la technique de **Gambin** [Gambin, 1991] (voir la section 1.2.1). Ils observent alors une surestimation de la contrainte globale en comparaison avec le critère de **Schmid** standard. Cela s'explique par une minimisation du contraste entre les réponses de chaque grain pour le modèle à critère unique. Même en faisant tendre le paramètre de régularisation vers une valeur grande ($N = 500$), les auteurs n'observent pas d'amélioration. D'autre part, nous avons introduit précédemment le modèle SRIX proposé dans [Forest and Rubin, 2016]. A notre connaissance, l'utilisation de ce modèle n'engendre aucune modification sur le tenseur tangent local (à l'inverse du critère de **Gambin**). La différence se situe dans le calcul de la vitesse de glissement γ^s sur le système s. Il faut encore choisir le paramètre R. Afin d'illustrer notre propos, un premier calcul a été réalisé, considérant 100 phases avec des orientations cristallographiques aléatoires (ϕ_1, Φ, ϕ_2) avec une élasticité locale cubique et aucune variable d'écrouissage. Le résultat pour plusieurs modèles à champ moyen est tracé sur la figure 2.15.

Pour de faibles valeurs de R, la réponse du modèle est confondue avec celle du modèle de Hill original. De plus grandes valeurs pour le paramètre R conduisent bien entendu à des niveaux de contrainte plus élevés. Les paramètres du modèle pourraient dans ce cas être identifiés à nouveau afin de ramener la courbe modifiée vers la courbe initiale. On pourrait aussi envisager une comparaison avec des simulations en champ complet. Ce point sort du cadre que nous nous sommes fixés dans cette thèse.

Simplification de l'approche de Hill

Berveiller et **Zaoui** [Berveiller and Zaoui, 1979] proposent de se placer dans le cas d'inclusions sphériques, avec une élasticité uniforme isotrope : on notera $\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}$ le tenseur d'élasticité de toutes les phases. L'opérateur tangent, qui est également isotrope, dépend de deux paramètres indépendants :

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{L}} = 3k^L \underset{\approx}{\boldsymbol{K}} + 2\mu^L \underset{\approx}{\boldsymbol{J}} \tag{2.71}$$

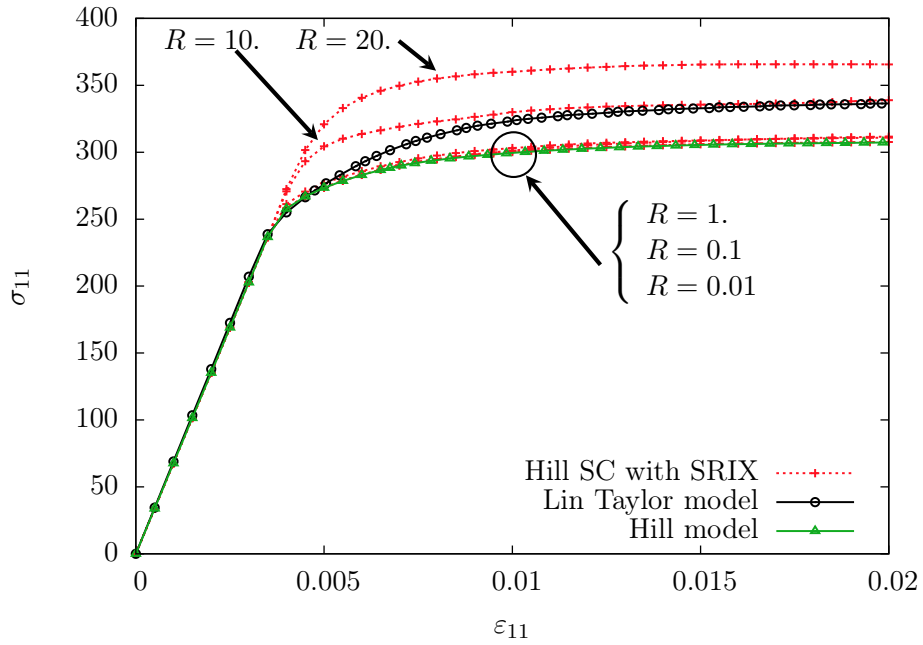


Figure 2.15 – *Comparaison du modèle de Hill avec à l'échelle locale, le critère de Schmid standard ou le modèle SRIX avec différentes valeurs du paramètre R de régularisation.*

où k^L représente un module de compressibilité et μ^L un module de cisaillement élasto-plastique. La relation 2.70 s'écrit alors :

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{\mathrm{g}} = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}} + \left(3k^L(\frac{1}{\alpha}-1)\underset{\approx}{\boldsymbol{K}} + 2\mu^L(\frac{1}{\beta}-1)\underset{\approx}{\boldsymbol{J}}\right) : (\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}}^{e} + \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}}^{p} - \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{e} - \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{p}) \tag{2.72}$$

En supposant le matériau incompressible, la trace de la déformation inélastique est supposée nulle. L'équation précédente devient :

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{\mathrm{g}} = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}} + (\frac{1}{\beta}-1)\frac{2\mu^L}{1+\frac{\mu^L}{\mu}(\frac{1}{\beta}-1)} : (\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}}^{p} - \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{p}) \tag{2.73}$$

Une formulation explicite a été proposée dans [Berveiller and Zaoui, 1979] pour les chargements monotones :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + 2\alpha\mu(1-\beta)(\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^{p} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{p}) \tag{2.74}$$

Le terme α permet d'assouplir l'interaction entre grains lorsque chaque phase se déforme plastiquement. La relation 2.74 relie les valeurs finies de contrainte et de déformation au lieu de leur taux, introduisant de nouveaux modules élasto-plastiques « sécants », μ^* et ν^*. Le terme α peut être défini par :

$$\alpha = \frac{15(1-\nu)\mu^*(7-5\nu^*)}{(7-5\nu)(2\mu(4-5\nu^*)+\mu^*(7-5\nu^*))} \tag{2.75}$$

Très souvent, le facteur α est simplifié en :

$$\alpha = \frac{1}{1+\frac{3}{2}\mu\frac{||\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^{p}||}{J(\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}})}} \tag{2.76}$$

Ce modèle est largement utilisé pour calibrer une loi de plasticité cristalline sur des réponses expérimentales macroscopiques, pour des polycristaux non texturés. Néanmoins, cette simplification ne permet pas de traiter les chargements cycliques ou non radiaux. Le terme α à lui seul ne suffit plus à caractériser les interactions plastiques et pour cela, **Cailletaud** [Cailletaud, 1987] puis **Pilvin** [Cailletaud and Pilvin, 1994] proposent de joindre ce terme à la déformation plastique en utilisant un jeu de variables internes $\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^g$. La relation communément appelée la règle en β s'écrit :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + 2\mu(1-\beta)(\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^g) \tag{2.77}$$

Il s'agit d'introduire une accommodation plastique dans la relation de transition d'échelles, sans renoncer à une forme explicite de celle-ci. Pour faire face à la complexité d'une quantification rigoureuse de l'effet généré, ils proposent de l'introduire sous une forme phénoménologique. La loi d'évolution de β^g est non linéaire en terme de vitesse de déformation plastique locale. En particulier, elle prend une forme similaire à celle de l'écrouissage cinématique non linéaire popularisée par **Chaboche** (e.g dans [Besson et al., 2001]). Cela se justifie par un second niveau d'hétérogénéité (les grains) au sein du matériau qui induit le développement de contraintes internes : on pourrait imager ce phénomène comme un « écrouissage de voisinage ». En premier lieu, la règle en β a été développée puis testée par [Cailletaud and Pilvin, 1994] sous l'hypothèse d'une élasticité isotrope. Puis la loi de transition d'échelle a été généralisée pour une élasticité anisotrope dans [Sai et al., 2006] tout en conservant l'approximation d'un comportement élastique uniforme :

$$\boxed{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}) : (\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^g)} \tag{2.78}$$

Une version de la règle en β avec une élasticité non-uniforme adaptée au cas d'un polymère bi-phasé a été développée dans [Ausias et al., 2007].
Malheureusement, le recalage qui précède nécessairement son utilisation rend la méthode difficilement utilisable pour identifier des paramètres locaux. On ne saura pas séparer dans cette procédure les effets de durcissement générés par le milieu de ceux du grain seul sans autre information provenant d'autres modèles. Dans le cas d'un matériau anisotrope, une forme générale de l'écrouissage intergranulaire peut s'écrire :

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}}^g = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{vp} - \underset{\approx}{\boldsymbol{D}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^g ||\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{vp}|| \tag{2.79}$$

où $||\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{vp}|| = \sqrt{\frac{2}{3}\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{vp} : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{vp}}$. La forme de $\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}$ dépend alors de la symétrie du MHE. Les auteurs supposent qu'il n'y a pas de couplage traction/cisaillement dans le paramètre d'accommodation plastique, ce qui conduit à :

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{D}} = \begin{pmatrix} D_{11} & D_{12} & D_{13} & 0 & 0 & 0 \\ D_{12} & D_{22} & D_{23} & 0 & 0 & 0 \\ D_{13} & D_{23} & D_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & D_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D_{66} \end{pmatrix} \tag{2.80}$$

Les composantes du tenseur $\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}$ peuvent être identifiées à l'aide de simulations par éléments finis ou d'un autre modèle multi-échelles. Toutefois, le tenseur variant avec le comportement

mécanique local du matériau, une première caractérisation du comportement local « monogranulaire » doit être effectuée. Enfin, la contribution macroscopique $\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}$ est choisie de manière à respecter la relation $\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} \rangle = \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}$. Avec l'expression 2.78, on trouve :

$$\left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{C}} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{S}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{I}}) : (\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{g}) \right\rangle = \underset{\sim}{\mathbf{0}}$$

$$\Leftrightarrow \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}} = \langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{g} \rangle \tag{2.81}$$

2.3.3 Un traitement plus rigoureux de la viscoplasticité

Le développement de modèles à champ moyen adaptés à la plasticité dépendante du temps a été motivé en grande partie par l'application aux matériaux composites (en témoigne le nombre d'ouvrages sur le sujet). La problématique souvent expliquée part du fait que le taux de déformation totale ne peut plus être exprimé uniquement en fonction du taux de contrainte par le biais d'un opérateur tangent (cf modèle de **Hill**). Une formulation générale du comportement local peut s'écrire :

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}(x,t) = \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}(x) : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}(x,t) + g(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}, \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp}, x, t) \tag{2.82}$$

Le comportement du MHE, précédemment cherché sous la même forme qu'à l'échelle locale, possèdent des termes nouveaux en lien avec des effets de mémoire longue vis-à-vis du trajet de chargement (e.g dans le cas d'un matériau ayant un comportement local viscoélastique maxwellien dans [Suquet, 1985]). Une première tendance observée dans la littérature a cherché à simplifier le problème pour se situer dans le cadre des résultats déjà connus. Dans [Weng, 1981], **Weng** considère que la partie viscoplastique de la déformation est « libre de contrainte » au sens d'Eshelby. L'auteur explique qu'à tout instant, la déformation en fluage ne dépend que de la contrainte à cet instant et de l'historique de la déformation et non du taux de contrainte. Finalement, il propose d'utiliser le modèle KBW, cohérent dans ce cas précis, pour actualiser à chaque incrément la contrainte :

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{\mathrm{g}} = 2\mu(1-\beta)(\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}}^{vp} - \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\mathrm{gvp}}) \tag{2.83}$$

où l'on suppose que la contrainte appliquée reste constante au cours du chargement ($\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}} = 0$). Toutefois, comme débattu dans [Zaoui and Masson, 2000], le verrou scientifique n'est pas dans la dépendance ou non de la déformation viscoplastique au taux de contrainte mais plutôt de la dépendance du MHE au comportement mécanique local, inconnue *a priori*. Finalement, considérer la déformation viscoplastique indépendante du chargement mécanique ramène le problème à des interactions élastiques au sein du polycristal. La même remarque peut être appliquée aux travaux de **Nemat Nasser et al** [Nemat-Nasser and Obata, 1986], qui proposent une approche similaire dans le cas des grandes déformations. Nous proposons dans la suite une revue succincte des modèles tenant compte de la viscoplasticité. Cela permettra dans le prochain chapitre d'alimenter la discussion sur le choix des modèles d'homogénéisation choisis dans cette étude. Si le lecteur souhaite plus de détails sur les équations, l'annexe 4 propose une description de certaines approches dans le cas élasto-viscoplastique.

Hypothèse du solide rigide

Les premières avancées sur la question de la plasticité dépendante du temps dans les modèles auto-cohérents ont pu être menées en faisant l'approximation « solide rigide ». Cela permet de supprimer la contribution élastique dans l'expression du comportement mécanique. L'hypothèse peut être justifiée quand il s'agit d'étudier le régime de fluage stabilisé d'un polycristal. Dans ce cas, la première étape consiste à linéariser le comportement mécanique à l'échelle locale et à supposer la même forme de relation pour le comportement mécanique macroscopique (plus d'effet de mémoire). Dans un second temps, un problème d'inclusion ayant le même formalisme que celui proposé par **Hill** pourra être résolu. On cherche donc une expression linéaire de la déformation (uniquement viscoplastique) telle que :

$$\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{\mathrm{gvp}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{M}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} + \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{0} \tag{2.84}$$

où $\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{0}$ représente une déformation existante sans chargement, qui est donc strictement « libre de contrainte » au sens d'**Eshelby**. On distingue trois grandes linéarisations développées dans ce contexte : la version sécante de **Hutchinson** [Hutchinson, 1976], la version tangente de **Molinari** [Molinari et al., 1987] et la version affine de **Zaoui** [Zaoui and Masson, 2000]. Il faut mentionner l'utilisation intensive de la seconde approche pour les polycristaux, largement popularisée par **Lebensohn** et **Tomé** sous l'appellation « ViscoPlastic Self-Consistent Scheme » (VPSC) [Lebensohn and Tomé, ,Lebensohn and Tomé, 1994]. En particulier, le code VPSC est développé dans le cadre des transformations finies et permet de rendre compte des modifications de texture observées au cours de la déformation irréversible.

Approche variationnelle

Les approches visco-plastiques décrites précédemment se calquent sur la façon de résoudre le problème hétérogène proposé par **Hill**. En particulier, elles sont basées elles aussi sur l'hypothèse de l'existence d'un module plastique uniforme au sein d'une phase. Néanmoins, pour des matériaux ayant un fort contraste de phase, il a été montré que ces procédures violent les bornes inférieures et supérieures de **Hashin** et **Strickman** étendues aux comportements non linéaires dans [Willis, 1981]. D'autre part, les fluctuations de la réponse au sein d'une phase peuvent être non négligeables et d'un ordre supérieur vis-à-vis des fluctuations entre phases. Les travaux de **Ponte-Castaneda** ont permis, dans un premier temps de construire une solution pour un matériau constitué de phases ayant des comportements non linéaires, en comparant le matériau de base complexe à un matériau dit « linéaire de comparaison » : on parle d'approche variationnelle [Ponte Castaneda, 1991,Ponte Castaneda, 1996]. L'approche a été ensuite complétée pour introduire une fluctuation au sein de chaque phase. Les modèles qui en découlent permettent de calculer des tenseurs sécants visco-plastiques actualisés par l'ajout d'un terme du second ordre faisant état de la covariance du champ mécanique. Le Milieu Homogène Equivalent n'est plus cherché en terme de « module apparent » liant la contrainte à la déformation mais plutôt sur la minimisation du potentiel dissipatif [Liu and Ponte Castaneda, 2004a,Liu and Ponte Castaneda, 2004b]. Il est à noter qu'en général, pour ces approches, il n'est plus équivalent de définir le problème en contrainte ou déformation.

Problème général de l'élasto-viscoplasticité

Afin d'introduire à nouveau l'élasticité, une méthode rigoureuse consiste à ramener le problème du milieu hétérogène à celui d'un comportement thermo-élastique qu'on sait résoudre (par exemple, la méthode expliquée dans [François et al., 1998]). Pour ce faire, une solution

proposée dans [Masson and Zaoui, 1999] est le passage dans le domaine de Laplace-Carson du problème complet élasto-viscoplastique par le biais d'une linéarisation affine. Ce transfert permet de résoudre le problème, qui est linéaire dans l'espace de Laplace, qu'il faut ensuite ramener dans l'espace réel. Certains auteurs ont relevé une certaine difficulté dans la transformée inverse, rendant la méthode coûteuse en temps de calcul. Cette classe de modèle est appelée « héréditaire » du fait qu'elle s'attache à chercher le comportement effectif en introduisant la dépendance à tout phénomène antérieur (formulation intégrale). Une autre procédure appelée « à variables internes » consiste à chercher le comportement effectif par une dépendance incrémentale à l'état du matériau uniquement pour un instant ponctuel. Son histoire est alors supposée être stocké dans les variables internes. Malheureusement, il est difficile de résoudre le problème par le schéma auto-cohérent classique sans hypothèse forte (e.g. modèle de **Kouddane** pour un matériau isotrope incompressible [Kouddane et al., 1994]). La stratégie qui a attiré notre attention consiste à construire le champ solution à partir des deux états asymptotiques, l'un purement élastique et l'autre purement visco-plastique. L'insertion d'un champ dit « translaté » et d'outils de projection aux propriétés remarquables permettent une résolution simplifiée du problème spatio-temporel [Paquin et al., 1999]. Une règle de localisation simple a été proposée dans [Sabar et al., 2002] dans le cadre de ce schéma :

$$\boxed{\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\sigma}}}^{\mathrm{g}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} : \left[\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\Sigma}}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}) : (\underset{\approx}{\boldsymbol{A}}^{g}_{B} : \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{E}}}^{vp} - \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\mathrm{gvp}})\right]} \tag{2.85}$$

où $\underset{\approx}{\boldsymbol{A}}^{g}_{B} = \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff\,-1} : \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{g})\right]^{-1}$ représente le tenseur d'accommodation en déformation dans le cas purement visco-plastique. Il est important de mentionner que cette relation est une simplification rigoureuse du cas général proposée par **Paquin** [Paquin et al., 1999, Paquin et al., 2001], où la solution conserve une symétrie des deux solutions asymptotiques. Au départ, le cas purement viscoplastique était traité en utilisant une régularisation sécante. l'approche a été étendue à une résolution affine dans [Mareau and Berbenni, 2015].

Par ailleurs, d'autres travaux menés en particulier par **Doghri** [Doghri et al., 2010] proposent une linéarisation affine directement dans l'espace temporel mais sur un incrément de temps infinitésimal :

$$\Delta\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{alg}(t+1) : (\Delta\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}} - \Delta\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{aff}) \tag{2.86}$$

On peut alors résoudre le problème hétérogène directement en utilisant le schema auto-cohérent de manière incrémentale. Néanmoins, cette discrétisation temporelle fait apparaître le pas de temps Δt dans l'expression de $\Delta\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{aff}$ et $\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{alg}(t+1)$, ce qui peut entraîner des instabilités dans la résolution numérique, en particulier dans le cas du polycristal. Une extension avec prise en compte des fluctuations du champ mécanique a été proposée dans [Doghri et al., 2011].

2.3.4 D'autres voies pour la micromécanique

On pourrait parler de micromécanique pour qualifier tous les modèles discutés précédemment dans le sens où ils font appel à des estimations plus locales du premier ou du second ordre. Néanmoins, l'information que donnent ces modèles sur le comportement d'un polycristal est bien loin du constat qui peut être fait lorsqu'on réalise des simulations en champ complet. En particulier, la fluctuation du champ mécanique au sein d'un grain est très importante, avec une erreur relative de près de 70% par rapport à une valeur moyenne par orientation cristallographique (cf la fin de la section 2.1). Ainsi, on réduit les informations importantes d'un

calcul CP-FE ou CP-FFT uniquement à des quantités moyennées (99% des informations sont omises). Mais utiliser directement le calcul sur VER sur chaque point de Gauss d'une structure, dans l'esprit de la « FE^2 » proposée par **Feyel**, est très coûteux [Feyel and Chaboche, 2000]. A la suite de ce constat, **Suquet** et **Michel** ont introduit l'approche NTFA pour Nonuniform Transformation Field Analysis [Michel and Suquet, 2009] basée sur le concept de la TFA initiée par **Dvorak** [Dvorak et al., 1994]. La méthode part du postulat qu'il y a des motifs de déformation induits par la texture du matériau (particulaire ou granulaire), et que ces motifs peuvent se décomposer en « modes propres » de telle manière que pour le champ des déformations plastiques, on a :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp}(x,t) = \sum_k \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{k,vp}(t)\mu^k(x) \tag{2.87}$$

A partir d'un calcul en champ complet, on obtient ces différents modes propres μ^k pour chaque variable (la déformation plastique) à des temps donnés (snapshots) par une méthode de type POD (Proper Orthogonal Decomposition). Ce faisant, l'information (des champs mécaniques) est condensée sous forme tensorielle, en ne prenant que certains vecteurs propres de la matrice globale, qui ont une grande valeur propre. Les auteurs montrent que deux modes propres peuvent suffire pour stocker quasiment toute l'information. La règle de localisation devient alors :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}(x) = \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}(x) : \underset{\approx}{\boldsymbol{A}}(x) : \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}(x) + \sum_i \rho_i(x)\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(k),vp}(t) \tag{2.88}$$

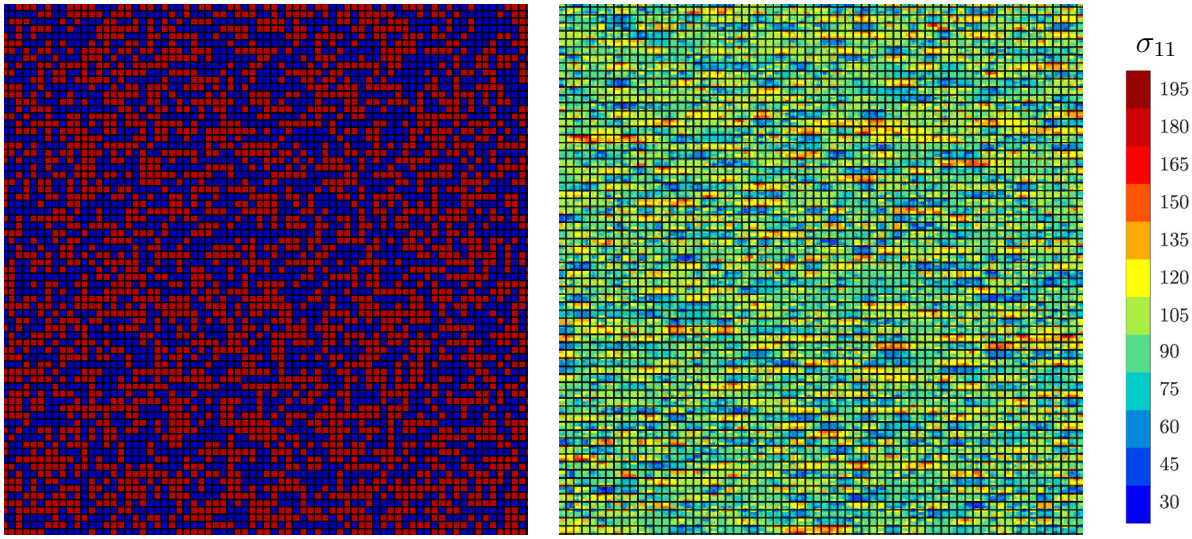
où $\rho_i(x) = \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}(x) : (\eta^k(x) - \mu^k(x))$, et $\underset{\approx}{\boldsymbol{L}}(x)$ et $\eta^k(x)$ sont les modules linéaires du comportement mécanique. L'idée est alors d'essayer de trouver la loi d'évolution pour ces variables réduites. Une première solution « exacte » consiste à les obtenir par un calcul en champ complet, en faisant des « allers-retours » pour les actualiser [Fritzen, 2010]. Dans [Michel and Suquet, 2009], des lois de comportement locales, basés sur des techniques d'homogénéisation, sont écrites sur ces variables réduites pour chaque mode k (contrainte, déformation, variables d'écrouissage, ...). Des évolutions de l'approche ont été permises par l'introduction du concept variationnel de **Ponte Castaneda** [Michel and Suquet, 2016]. Un gain en précision et une réduction des temps de calcul sont constatés par rapport à l'approche directe sur l'actualisation des variables réduites. Ce type de modélisation a été utilisé avec succès pour calibrer les paramètres matériau locaux de la glace sur une large gamme de température [Montagnat et al., 2014]. A notre connaissance, ces travaux représentent aujourd'hui, la voie optimale pour représenter le comportement mécanique d'un milieu hétérogène. Avec la règle de localisation, le modèle est à même de reconstruire (en post-processing) le champ local mécanique en tout point, mais pour la même microstructure que celle utilisée pour la définition des modes plastiques.

Si par contre on souhaite que le modèle soit capable de fournir la réponse locale pour n'importe quelle microstructure, cette approche est encore éloignée du but final. Pour construire un méta-modèle permettant de rendre compte des effets de texture cristallographique sur la réponse locale du matériau (pas moyennée), il faut introduire de nouveaux ingrédients. Peut-être faudrait-il écrire explicitement l'effet de tous les acteurs qui font que la contrainte (la déformation) en un point M d'un volume hétérogène prend une valeur donnée. Pour l'agrégat cristallin, une liste non exhaustive commencerait par énumérer le chargement, l'orientation cristallographique du grain, sa morphologie, la position du point dans ce grain, les voisins direct, leur forme, leur orientation cristallographique, ... Une relation générale tirée de l'approche systémique de **Kroner** dans le régime élastique s'écrit [Kröner, 1981] :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}(x) = \underset{\approx}{\boldsymbol{A}}(x) : \underset{\sim}{\boldsymbol{E}} \tag{2.89}$$

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{A}}(x) = \underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \left\langle \Gamma^r(x,x')\underset{\approx}{\boldsymbol{\delta C}}(x') \right\rangle + \left\langle \Gamma^r(x,x')\underset{\approx}{\boldsymbol{\delta C}}(x')\Gamma^r(x',x'')\underset{\approx}{\boldsymbol{\delta C}}(x'') \right\rangle - \ldots$$

avec $\underset{\approx}{\boldsymbol{\delta C}}(x) = \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^g - \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff}$ pour x appartenant à la phase g et $\Gamma^r(x,x')$ représente le tenseur de Green modifié. Le développement peut être poursuivi jusqu'à x^n si nécessaire. Pour le moment, on résout le problème dans le formalisme simplifié de l'inclusion ellipsoïdale (calcul analytique), et à l'ordre 1. Faut-il continuer à essayer de résoudre ce problème ? La « force brute » du calcul ne serait-elle pas la prochaine étape ? Pour illustrer le propos, faisons un calcul simple sur une grille de 40 000 éléments en deux dimensions où chaque élément carré possède une orientation cristallographique $\phi_1 \in \{0°, 45°\}$ et un comportement élastique avec une symétrie cubique (voir la figure 2.16).



a. b.

σ_{11} max : 193 MPa et min : 24 MPa

Figure 2.16 – *a. Zoom sur une « Microstructure en damier » ayant deux valeurs d'orientations cristallographiques (0,0,0) en bleu et (45,0,0) en rouge. b. Iso-contour de la contrainte σ_{11} pour un chargement à déformation imposée ($E_{11} = 0.001$ et $E_{ij} = 0$) et un comportement linéaire élastique à symétrie cubique ($C_{1111} = 203\,760$ MPa, $C_{1122} = 125\,490$ MPa et $C_{1212} = 112\,000$ MPa).*

Le chargement est une traction dans la direction horizontale $\vec{x}_1$ (les autres déformations globales sont nulles) avec des conditions aux limites périodiques. On peut tenter alors de hiérarchiser l'ensemble des réponses obtenues moyennées sur chaque grain, et cela pour différentes réalisations. La figure 2.17 montre une segmentation progressive du nuage de points initial sur la contrainte et déformation principale.

La figure 2.17 montre une segmentation de plus en plus fine du nuage de points obtenu, c'est-à-dire que nous allons chercher à définir des « boîtes » de plus en plus descriptives pour trier les points. Au départ, nous considérons deux boîtes qui représentent les deux orientations cristallographiques possibles pour un grain (voir la figure 2.17.a). Puis nous affinons la définition des boîtes en ajoutant l'orientation des grains partageant une arête avec le grain central étudié (voir la figure 2.17.b). L'écart type normé sur la contrainte passe alors de $15{,}1\,\%$ avec une segmentation uniquement avec l'orientation cristallographique du grain central à $6{,}97\,\%$ si la

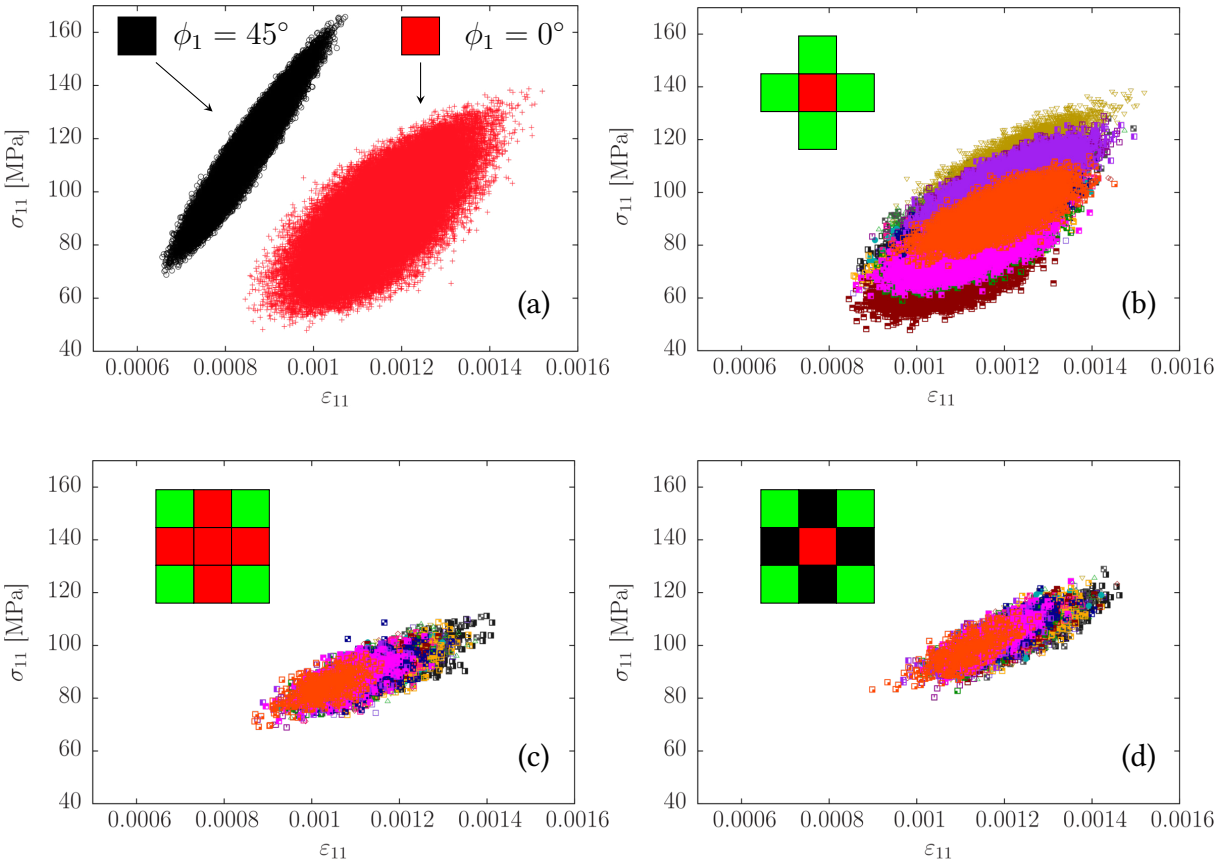


Figure 2.17 – *Evolution du nuage de points en fonction de la segmentation réalisée : (a) Tri par orientation du grain, (b) tri par orientation et pour les voisins latéraux et (c,d) tri par orientation et pour tous les voisins à l'ordre 1. Le carré vert correspond à un grain pouvant prendre l'orientation (0,0,0) ou (45,0,0). Travail réalisé pour 5 réalisations i.e. 200 000 « grains »*

segmentation inclut l'orientation cristallographique des 4 voisins, horizontaux et verticaux. Par contre, cet enrichissement de la définition des boîtes a peu d'impact sur la déformation, l'écart-type évoluant de $7{,}44\,\%$ à $7{,}03\,\%$. Nous proposons enfin d'ajouter les orientations cristallographiques des grains partageant uniquement un coin avec le grain central étudié (voir les figures 2.17.c,d). Cette nouvelle segmentation permet de réduire l'écart-type en contrainte à $6{,}36\,\%$ avec ces 4 autres voisins situés dans le prolongement des diagonales du grain, carré. En déformation, cette nouvelle segmentation permet d'atteindre un écart-type de $5{,}15\,\%$. Par ce modèle simple, nous observons que les voisins partageant une arête avec le grain étudié influent plus sur la contrainte que sur la déformation alors que les voisins partageant seulement un coin jouent plus sur la déformation. Pour une nouvelle microstructure en damier, nous sommes capables de reconstruire le champ de déformation et de contrainte sans réaliser de calcul mais en utilisant les valeurs moyennes de chaque boîte, et cela avec une erreur maximale de $6\,\%$. Le calcul mécanique laisse place alors à un algorithme de recherche efficace. En effet, il suffit de balayer chaque grain, de trouver la boîte à laquelle il appartient puis de lui assigner la valeur moyenne obtenue durant l'étape d'apprentissage. L'erreur peut être encore réduite en ajoutant les voisins plus éloignés. Puisque cette méthode de reconstruction des champs de contrainte et déformation est complètement indépendante d'un grain à l'autre, il est possible de rendre l'algorithme massivement parallèle.

Dans notre illustration très simplifiée, tous les grains ont la même morphologie et la même taille. Pour une morphologie plus proche de la réalité (par exemple le cas Voro-N), l'étape de segmentation est plus complexe. Pour une microstructure quelconque, la difficulté se résume à trouver une fonction bijective pour qualifier l'entourage d'un point dans une sphère d'influence donnée. Une méthode élégante et rigoureuse a été proposée en particulier par **Kalidindi** sous l'appellation « Material Knowledge System » (MKS) [Kalidindi, 2012]. Ce « méta-modèle » se base sur la relation « physique » 2.89 mais les termes en série dans le tenseur de localisation $\underset{\approx}{\boldsymbol{A}}(x)$ sont remplacés par des tenseurs calibrés en réalisant des expériences numériques selon :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}_s = \sum_h^H \sum_{t\in S} \underset{\approx}{\boldsymbol{\alpha}}{}_t^h m_{s+t}^h + \sum_h^H \sum_{h'}^H \sum_{t\in S} \sum_{t'\in S} \underset{\approx}{\boldsymbol{\alpha}}{}_{tt'}^{hh'} m_{s+t}^h m_{s+t+t'}^{h'} + \ldots \tag{2.90}$$

Cette relation s'explique en langue naturelle. La microstructure est découpée en voxel (pixel en 2D) s et devient une mosaïque S de taille $|S|$. Des coefficients d'influence d'ordre 1 à n $\underset{\approx}{\boldsymbol{\alpha}}$ sont cherchés, quantifiant l'effet d'un pixel t et de la phase h sur le pixel s [Landi et al., 2010]. D'autre part, des fonctions « définissant la microstructure » m permettent de caractériser l'entourage du pixel s à un rayon t [Niezgoda et al., 2011]. L'ensemble de la méthode est proposée sous forme d'une librairie Python (PyMKS). L'approche montre de bons résultats sur des polycristaux avec des erreurs inférieures à 1%. La microstructure ressemble alors à celle du cas Voro-GP où le joint de grains est voxelisé. Il faut maintenant regarder comment il est possible d'étendre la méthode à la plasticité (non linéarités, dépendance au trajet de chargement, ...). Ces « méta-modèles » peuvent être ensuite utilisés dans des approches descendantes de design du matériau ($i.e.$ rechercher une microstructure optimale pour atteindre les performances ciblées).

CHAPITRE 3

Construction d'un modèle pour le superalliage DS200

Sommaire

3.1 **Développement d'une règle en β en élasticité hétérogène** 84

3.2 **Analyse des réponses mécaniques en champ moyen et en champ complet pour un alliage DS** 96

3.3 **De l'agrégat numérique au matériau réel** 112

Il n'existe pas de solution unique pour modéliser le comportement mécanique d'un agrégat polycristallin. Pour faire un choix, il faut donc cibler les objectifs du modèle : le niveau d'information (global, par phase, les fluctuations intra-phases, ...) qu'on souhaite en sortie, la confiance à donner aux résultats et le temps nécessaire pour y arriver. Dans notre cas, l'objectif final sera d'employer le modèle dans le cadre du calcul d'une structure complexe soumis à des chargements thermo-mécaniques anisothermes. Nous avons privilégié la modélisation en champ moyen pour plusieurs raisons, mais surtout dans le but précis de voir apparaître l'effet de la texture cristallographique comme principal vecteur d'anisotropie. Les coûts de simulation, connus comme étant élevés dans ce genre d'approche [Shenoy et al., 2006], sont largement réduits dans le cas des alliages DS, dont la microstructure peut être discrétisée à l'aide d'un seul angle d'**Euler** (nous utilisons 30 phases). En utilisant des techniques de parallélisation sur la loi de comportement (multi-threading), les temps de calcul peuvent donc rester compétitifs.

Néanmoins, la dénomination « approche à champ moyen » recouvre à ce jour un grand nombre de modèles qui se différencient par les hypothèses faites sur le comportement local ou les phénomènes prépondérants. Les temps de calcul peuvent alors évoluer d'un facteur 10 à 100 en fonction de la formulation choisie. Les plus simples et rapides sont les transitions d'échelles explicites qui découlent de l'hypothèse de **Kröner, Budiansky et Wu** sur une accommodation élastique. La règle en β permet d'enrichir la formulation par une accommodation plastique phénoménologique des grains. Cela permet de conserver la rapidité de calcul, les nouvelles variables internes étant alors intégrées efficacement comme celles introduites pour l'écrouissage. Des modélisations utilisant ce type de formulation ont déjà été menées sur des alliages DS dans [Sai et al., 2006, Martin et al., 2014]. Dans les études précédentes, la règle en β, développée sous une forme anisotrope, était comparée à des simulations CPFE et au modèle à champs translatés (CT) proposé par **Sabar et al** [Sabar et al., 2002]. De meilleurs résultats étaient observés pour le modèle CT sur les réponses macroscopiques en traction ou torsion uniaxiale (même après calibrage du modèle en β). En observant les courbes locales, les auteurs de [Martin et al., 2014] expliquent que les différences entre les deux modèles en champ moyen sont induites par l'hypothèse d'une élasticité uniforme dans la loi en β. Une sous-estimation des fluctuations entre phases dans le domaine élastique est observée pour la règle en β, introduisant un biais au début de l'écoulement plastique.

Une première partie du présent chapitre est consacrée à l'expression d'une règle en β sous l'hypothèse d'une élasticité locale hétérogène dans l'agrégat, dépendant de l'orientation de chaque grain. Nous discuterons alors des répercutions que cette formulation impose sur le jeu de variables internes $\boldsymbol{\beta}^g$. De nouvelles comparaisons seront effectuées entre la règle en β modifiée, le modèle CT et les calculs CPFE, en introduisant également les estimations locales. Enfin, une troisième partie confrontera le modèle aux essais expérimentaux menés dans la direction transverse à l'axe de solidification.

3.1 Développement d'une règle en β en élasticité hétérogène

3.1.1 De la formulation incrémentale de Hill à une règle en β « hétérogène »

L'approche incrémentale proposée initialement par **Hill** [Hill, 1965] est basée sur l'hypothèse qu'il existe un jeu d'opérateurs tangents uniformes par phase $\underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^g$ reliant le taux de contrainte au taux de déformation local. Le comportement mécanique du milieu homogène équivalent (MHE) est supposé s'écrire sous la même forme, avec un opérateur tangent effectif $\underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff}$ différent des tenseur $\underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^g$ et reliant les mêmes quantités globales. La relation de localisation est définie comme :

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{\mathrm{g}} = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{-1} - \underset{\approx}{\boldsymbol{I}}) : (\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{E}}} - \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\mathrm{g}}) \tag{3.1}$$

En réalisant un produit de la quantité $\underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff^{-1}}$ sur les deux côtés de l'égalité, la transition d'échelle devient :

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff^{-1}} : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{\mathrm{g}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff^{-1}} : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}} + (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}) : (\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{E}}} - \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\mathrm{g}}) \tag{3.2}$$

Une décomposition additive du taux de déformation (hypothèse des petites perturbations) permet de reformuler la relation en :

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff^{-1}} : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{\mathrm{g}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff^{-1}} : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}} + (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}) : (\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff^{-1}} : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}} + \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{E}}}^p - \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g^{-1}} : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{\mathrm{g}} - \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{pg})$$

Les termes qui dépendent du taux de contrainte local d'une part et du taux de contrainte global d'autre part sont regroupés de manière à obtenir :

$$\begin{aligned} [\underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff^{-1}} + (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}) : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g^{-1}}] : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{\mathrm{g}} &= [\underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff^{-1}} + (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}) : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff^{-1}}] : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}} + \ \ldots \\ &\ldots \ + (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}) : (\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{E}}}^p - \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{pg}) \end{aligned} \tag{3.3}$$

Avec le produit par $\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff}$, on fait apparaître le tenseur d'accommodation élastique $\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^* = \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}})$ utilisé dans la partie 2.3 :

$$\begin{aligned} [\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} : \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff^{-1}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^* : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g^{-1}}] : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{\mathrm{g}} &= [\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} : \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff^{-1}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^* : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff^{-1}}] : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}} + \ \ldots \\ &\ldots \ + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^* : (\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{E}}}^p - \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{pg}) \end{aligned} \tag{3.4}$$

Deux tenseurs « de localisation » sont alors introduits :

$$\left\{\begin{array}{rcl} \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g-1} & = & \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} : \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff^{-1}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{*} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g-1} \\ & = & \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g-1} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} : \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff^{-1}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g-1}) \\ \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{eff^{-1}} & = & \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} : \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff^{-1}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{*} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff^{-1}} \\ & = & \underset{\approx}{\boldsymbol{I}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} : \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff^{-1}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff^{-1}}) \end{array}\right. \tag{3.5}$$

Le premier terme rend compte d'un contraste entre le comportement du grain et le comportement effectif tandis que le second traduit l'assouplissement dans le régime plastique (il est égal au tenseur identité d'ordre 4 dans le domaine élastique). Le taux de contrainte local peut être isolé de manière à avoir :

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{\mathrm{g}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g} : \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{eff^{-1}} : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{*} : (\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}}^{p} - \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{pg}) \tag{3.6}$$

La démarche de **Kröner** consistant à remplacer $\underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff} = \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff}$ est alors employée. Les deux tenseurs introduits dans 3.5 se simplifient alors :

$$\left\{\begin{array}{rcl} \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g-1} & = & \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g-1} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} : \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff^{-1}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g-1}) \\ \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{eff} & = & \underset{\approx}{\boldsymbol{I}} \end{array}\right. \tag{3.7}$$

Avec cette hypothèse, le tenseur $\underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}$ devient égal au tenseur de localisation trouvé dans le cas purement élastique de la partie 2.3, que nous noterons $\underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E}$ pour faire référence à la simplification de $\underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff} = \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff}$. L'élimination des tenseurs elastoplastiques permet d'intégrer la relation de localisation :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{*} : (\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^{p} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pg}) \tag{3.8}$$

On retrouve alors ce qu'on appelle : le modèle « KBW hétérogène ». On introduit alors l'accommodation plastique dans la forme intégrée par l'intermédiaire du jeu de variables internes $\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{g}$ donnant :

$$\boxed{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} : \left[\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{*} : (\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{g})\right]} \tag{3.9}$$

Contrairement à la formulation en élasticité uniforme où les tenseurs devant $\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{\mathrm{g}}$ et $\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}}$ peuvent s'éliminer dans 3.3, le fait de partir du modèle de **Hill** montre qu'une accommodation plastique intervient aussi sur le premier terme en $\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}$ (mais nous la négligeons afin de rendre la relation explicite). Durant les premiers incréments plastiques, il est possible que l'accommodation intergranulaire soit assouplie par le terme $\underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g} : \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{eff^{-1}}$, qui dépend du tenseur tangent élastoplastique effectif et qui agit sur le module apparent de chaque phase. Comme la variable interne β est très faible dans cet intervalle, nous pouvons imaginer que malgré son recalage, elle ne suffise pas à représenter convenablement l'accommodation plastique. En pratique, on remarquerait une surestimation du modèle dans ce régime transitoire (même réponse que le modèle KBW). Il est toujours possible d'ajuster la loi d'évolution de $\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{g}$ pour rattraper, *a posteriori* cette surestimation en jouant sur l'écrouissage « de voisinage ». Dans la suite, nous supposerons qu'en plasticité commençante, $\underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff} \approx \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff}$.

Propriétés du MHE : La règle de localisation doit conserver la propriété $\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} \rangle = \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}$ (moyenne sur le volume). Deux relations découlent de cette condition :

$$\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} \rangle = \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} \Rightarrow \begin{cases} \left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} \right\rangle = \underset{\approx}{\boldsymbol{I}} \\ \left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{*} : (\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{g}) \right\rangle = \underset{\sim}{\boldsymbol{0}} \end{cases} \tag{3.10}$$

La première conduit à une expression du tenseur d'élasticité effectif $\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff}$, inchangée par rapport au cas purement élastique décrit dans la partie 2.3, par les manipulations :

$$\left\langle \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g-1} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} : \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff^{-1}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g-1}) \right]^{-1} \right\rangle = \underset{\approx}{\boldsymbol{I}}$$

$$\Leftrightarrow \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} = \left\langle \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g-1} + \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff^{-1}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g-1}) \right]^{-1} \right\rangle$$

$$\Leftrightarrow \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} = \left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} : \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff^{-1}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} - \underset{\approx}{\boldsymbol{I}}) \right]^{-1} \right\rangle = \left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} : \underset{\approx}{\boldsymbol{A}}^{g}_{E} \right\rangle \tag{3.11}$$

où $\underset{\approx}{\boldsymbol{A}}^{g}_{E} = \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g-1} : \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff}$ représente le tenseur de localisation dans le cas purement élastique, qui relie linéairement la déformation globale à la déformation locale. Comme discuté précédemment, l'équation implicite sur le tenseur d'élasticité effectif est résolue de manière itérative en utilisant la borne de **Voigt** à la première itération.

La seconde relation informe sur l'évolution de la variable d'accommodation plastique effective $\boldsymbol{\beta}$, qui dans le cas d'une élasticité homogène se réduit à la moyenne volumique des $\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{g}$. L'expression est maintenant plus compliquée :

$$\left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} \right\rangle : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{*} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}} = \left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{*} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{g} \right\rangle$$

$$\Leftrightarrow \boxed{\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{*-1} : \left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{*} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{g} \right\rangle} \tag{3.12}$$

On retrouve bien $\boldsymbol{\beta} = \langle \boldsymbol{\beta}^{g} \rangle$ pour une élasticité uniforme. De même, le taux de déformation plastique global n'est plus une simple moyenne volumique des mêmes quantités locales. La relation 3.9 peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} : (\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\mathrm{g}} - \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\mathrm{gvp}}) = \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} : (\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}} - \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}}^{p}) + \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{*} : (\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}} - \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}}^{g}) \tag{3.13}$$

En isolant le terme facteur du taux de déformation plastique global et en réalisant une moyenne volumique du membre à droite du signe égal, on trouve :

$$\begin{aligned} \left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g-1} : \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} \right\rangle : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}}^{p} \quad = \quad & \langle \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\mathrm{gvp}} \rangle + \left\langle -\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g-1} : \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} \right\rangle : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}} + \ \ldots \\ \ldots \quad & + \left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g-1} : \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{*} : (\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}} - \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}}^{g}) \right\rangle \end{aligned} \tag{3.14}$$

Puisque $\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g-1} : \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} = \underset{\approx}{\boldsymbol{A}}^{g}_{E}$, il est facile de montrer que la moyenne volumique de ce tenseur de localisation est égale au tenseur identité d'ordre 4. On peut réduire la relation 3.14 en :

$$\boxed{\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}}^{p} = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\mathrm{gvp}} + \left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g-1} : \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{*} : (\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}} - \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}}^{g}) \right\rangle} \tag{3.15}$$

Discussion sur la loi d'évolution de $\boldsymbol{\beta}^g$: Les variables $\boldsymbol{\beta}^g$ traduisent une forme de durcissement se déroulant à l'échelle du polycristal et causée par des interactions entre les grains. L'équation régissant l'évolution de ces variables internes est supposée non linéaire. La forme générale proposée par **Saï et al** s'écrit [Sai et al., 2006] :

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}}^g = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\mathrm{gvp}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{D}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^g \sum_s |\dot{\gamma}^s| \tag{3.16}$$

où le tenseur d'accommodation $\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}$ reste à ajuster. Pour les auteurs, il possède les mêmes symétries que le MHE, $i.e.$ isotrope transverse pour les alliages DS. Une condition sur le tenseur $\boldsymbol{\beta}^g$ est que sa trace soit nulle. Supposons que la trace de $\boldsymbol{\beta}^g$ soit nulle à l'incrément précédent, pour que cette condition soit satisfaite, il faut que (en sachant que $\mathrm{trace}(\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\mathrm{gvp}}) = 0$) :

$$\mathrm{trace}(\underset{\approx}{\boldsymbol{D}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^g) = 0 \tag{3.17}$$

Si $\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}$ possède une symétrie isotrope transverse, une expression analytique sera :

$$(D_{11} + D_{12} + D_{23})(\beta^g_{11} + \beta^g_{22}) + (D_{33} + 2D_{23})\beta^g_{33} = 0$$

$$\Leftrightarrow (D_{11} + D_{12} + D_{23})(\beta^g_{11} + \beta^g_{22}) - (D_{33} + 2D_{23})(\beta^g_{11} + \beta^g_{22}) = 0$$

$$\Leftrightarrow (D_{11} + D_{12} - D_{23} - D_{33})(\beta^g_{11} + \beta^g_{22}) = 0$$

$$\Leftrightarrow D_{33} = D_{11} + D_{12} - D_{23} \tag{3.18}$$

Toutefois, nous avons remarqué sur les calculs en champ complet de la partie 2.1 que pour une traction simple dans la direction transverse sur une microstructure DS, les déformations dans la direction longitudinale $\vec{x}_3$ étaient uniforme. Or le modèle en β tel qu'il est écrit ne donne pas un tel résultat (voir la figure 3.1).

Pour traduire ce phénomène, nous commençons par réécrire la relation de localisation :

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g\ -1}_{E} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^* : (\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^g) \tag{3.19}$$

Les manipulations successives permettent de reformuler l'expression précédente en :

$$\begin{aligned} \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g\,-1} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} : \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff\,-1} - \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g\,-1})\right] \ &: \ \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^g : \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{g}e} = \ldots \\ \ldots = \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} : \underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^e + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}) \ &: \ (\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^g) \end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff\,-1} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^g - \underset{\approx}{\boldsymbol{I}})\right] : \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{g}e} = \underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^e + (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}) : (\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^g) \tag{3.20}$$

Pour la composante ε_{33}, le problème peut s'écrire en notation de **Voigt** :

$$\left[I_{3k} + S_{3u}(\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff\,-1} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^g - \underset{\approx}{\boldsymbol{I}})_{uk}\right] : \varepsilon^{g,e}_k = E^e_3 + \beta_3 - \beta^g_3 + S_{3k}\beta_k - S_{3k}\beta^g_k \tag{3.21}$$

Le fait que la troisième ligne du tenseur d'**Eshelby**, $\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}$, soit pleine de zéros entraîne :

$$\forall u \in [1,6],\ S_{3u} = 0$$

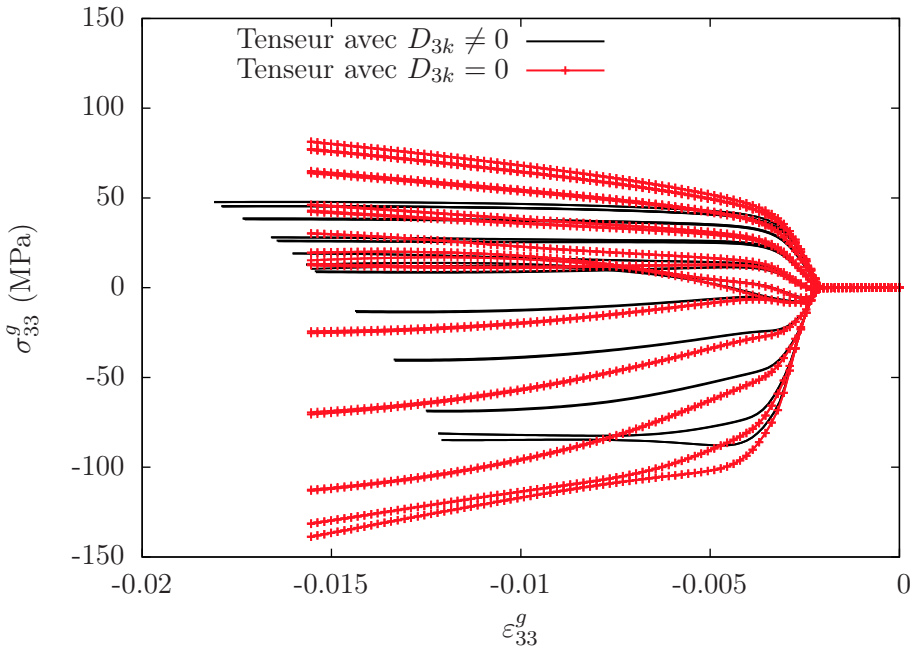


Figure 3.1 – *Réponses mécaniques locales par phase cristallographique obtenues avec la règle en β « hétérogène » et un paramètre d'accommodation contenant ou non une troisième ligne pleine de zéros.*

La relation 3.21 se simplifie en :

$$\varepsilon_3^{g,e} = E_3^e + \beta_3 - \beta_3^g \tag{3.22}$$

En prenant $\beta_3^g = \varepsilon_3^{g,p}$, on vérifie :

$$\varepsilon_3^g = E_3^e + \beta_3 \tag{3.23}$$

Par une sommation de toutes les déformations totales locales pondérées par les fractions volumiques de chacune (moyenne volumique), on obtient la condition $\beta_3 = E_3^p$. De plus, l'uniformité sur la déformation longitudinale est assurée puisque :

$$\forall g,\ \varepsilon_{33}^g = E_{33}$$

Finalement, un tel résultat s'obtient en introduisant un tenseur d'accommodation $\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}$ avec une troisième ligne pleine de zéros. Un autre choix aurait pu être, choix non retenu dans la thèse, de construire une loi plus générale du type :

$$\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\beta}}}^g = \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\mathrm{gvp}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{D}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^g \sum_s |\dot{\gamma}^s| \tag{3.24}$$

Dans ce cas, c'est le tenseur d'**Eshelby** qui donnera directement pour le cas DS la condition $\beta_{33}^g = \varepsilon_{33}^{g,p}$ (par « ses zéros » sur la troisième ligne). Pour l'expression sans le tenseur $\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}$ (mais *a priori* cela est vrai avec), cette ligne de zéros pose le problème sur la trace de $\boldsymbol{\beta}^g$. En effet, supposons comme précédemment que la trace soit nulle pour l'incrément précédent, alors la trace restera nulle si :

$$(D_{11} + D_{12})(\beta_{11}^g + \beta_{22}^g) + 2D_{23}\beta_{33}^g = 0$$

$$\Leftrightarrow D_{23} = \frac{1}{2}(D_{11} + D_{12}) = 0 \tag{3.25}$$

Alors, il ne reste plus que 4 composantes à identifier. Pour un tenseur isotrope transverse, la condition n'est pas difficile à respecter. Maintenant si on considère une symétrie cubique du tenseur $\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}$, alors cela revient à :

$$D_{11} = D_{12}$$

Cette égalité est plus contraignante. Et puis, il est possible de complexifier encore les choses en définissant ce paramètre d'accommodation dans le repère cristallographique. Cela permettrait d'amplifier la dépendance de l'accommodation plastique phénoménologique à l'orientation du grain. Si on suppose un tenseur de symétrie cubique (comme le tenseur d'élasticité du grain) qui s'écrit dans le repère cristallographique, :

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}^g = \begin{pmatrix} D_{1111} & D_{1122} & D_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ D_{1122} & D_{1111} & D_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D_{1212} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & D_{1212} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D_{1212} \end{pmatrix}$$

la loi d'évolution s'écrit finalement :

$$\boxed{\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\beta}}}^g = \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\mathrm{gvp}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{D}}^g : \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^g \sum_s |\dot{\gamma}^s|} \tag{3.26}$$

La condition pour que la trace de $\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^g$ soit nulle ne peut plus être vérifiée quel que soit g. Et d'ailleurs, elle ne l'est pas. A notre connaissance, il n'existe pas d'interdiction à cela. Néanmoins, il est nécessaire de vérifier que la déformation plastique globale conserve une trace nulle, sinon il serait difficile d'expliquer que le volume n'est pas conservé pour une déformation inélastique. Mais est-ce que pour la formulation choisie, $\mathrm{trace}(\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^g) = 0 \Rightarrow \mathrm{trace}(\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^p) = 0$? Pour montrer que $\mathrm{trace}(\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^p) = 0$, il faut prouver que :

$$\mathrm{trace}\left(\left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g-1} : \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^g_E : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^* : (\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\beta}}} - \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\beta}}}^g) \right\rangle\right) = 0 \tag{3.27}$$

Or il ne semble pas suffisant que $\mathrm{trace}(\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^g)$ soit nulle pour que la condition sur la déformation plastique soit satisfaite. Toutefois, nous avons vérifié cette condition de manière empirique en regardant sur de nombreux chargements, la valeur de la trace exprimée en 3.27. Durant tous les tests, l'algorithme a trouvé une valeur nulle pour la trace de la déformation plastique macroscopique. D'autre part, il est important de mentionner que le champ de déformation macroscopique homogène dans la direction longitudinale est issue de l'hypothèse de départ consistant à choisir une morphologie colonnaire et un axe cristallographique $\langle 001 \rangle$ confondu avec l'axe macroscopique $\vec{x}_3$. Avec une désorientation primaire des grains, nous verrons que l'utilisation du modèle nécessite un travail supplémentaire (voir la partie 3.3 de ce chapitre). Toutefois, l'avantage de cette formulation pour la variable $\dot{\beta}^g$ est que, naturellement, une hétérogénéité de la déformation plastique va apparaître pour une valeur de l'angle d'**Euler** Φ non nulle (plus de ligne de zéros dans la matrice $[D^g]$ représentant le tenseur d'accommodation $\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}^g$). Les différences entre les deux règles en β, celle de **Saï et al** et celle proposée dans ce paragraphe, sont rassemblées en :

Règle en β [Sai et al., 2006]

$$
\begin{aligned}
\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} &= \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{*} : (\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{g}) \\
\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}} &= \langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{g} \rangle \\
\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{E}}}^{vp} &= \langle \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\mathrm{gvp}} \rangle \\
\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\beta}}}^{g} &= \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\mathrm{gvp}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{D}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{g} \sum_{s} |\dot{\gamma}^{s}|
\end{aligned}
$$

Règle en β proposée

$$
\begin{aligned}
\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{g}} &= \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} : [\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{*} : (\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{g})] \\
\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}} &= \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{*-1} : \left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{*} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{g} \right\rangle \\
\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{E}}}^{p} &= \langle \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\mathrm{gvp}} \rangle + \left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g-1} : \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{*} : (\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\beta}}} - \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\beta}}}^{g}) \right\rangle \\
\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\beta}}}^{g} &= \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\mathrm{gvp}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{D}}^{g} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{g} \sum_{s} |\dot{\gamma}^{s}|
\end{aligned}
$$

Pour finir, un schéma récapitulatif est proposé en figure 3.2.

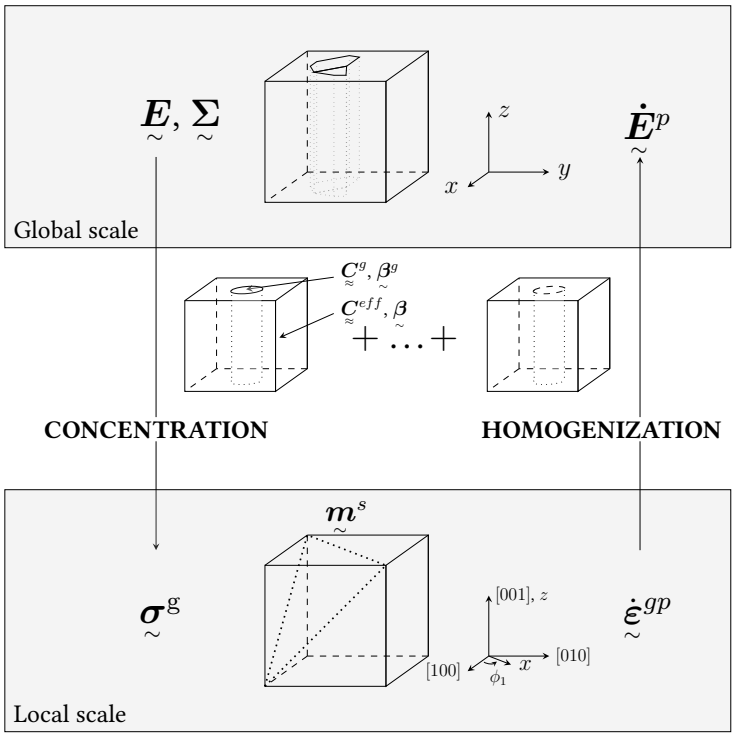


Figure 3.2 – *Schéma de principe pour les techniques en champ moyen.*

3.1.2 Premiers résultats

Nous proposons d'étudier quelques effets qui découlent des modifications apportées à la règle en β.

Surfaces de charge

La construction des surfaces de charge est réalisée à l'aide du module $yield_surface$ disponible sous le code Z-set. Il s'agit d'identifier le domaine pour lequel aucun système de glissement est actif. Il faut donc calculer la cission résolue pour tous les systèmes de glissement, qui doit rester inférieure à une valeur critique τ_c. Dans le cas de l'élasticité uniforme [Sai et al., 2006], le problème se ramène à considérer le système de $12 \times N_{grains}$ équations :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^{s,g} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} - \tau_c = 0 \tag{3.28}$$

Une formulation analytique dans le cas DS a été proposée dans [Sai et al., 2006] en supposant Φ et ϕ_2 nuls. La simplicité dans la résolution part de l'hypothèse d'uniformité de la contrainte dans le régime élastique. Pour une élasticité hétérogène, l'expression est plus complexe à cause de la redistribution de contrainte :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^{s,g} : \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} - \tau_c = 0 \tag{3.29}$$

En langage naturel, les deux problèmes se traduisent en :

Elasticité uniforme : la surface de charge est délimitée par le grain ayant le facteur de Schmid le plus fort (qui se calcule à partir de $\underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^{s,g}$).

Elasticité hétérogène : une compétition s'opère entre le facteur de Schmid (piloté par $\underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^{s,g}$) et le module élastique apparent (piloté par $\underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g}_{E}$).

Par conséquent, il est possible que ce ne soit pas le même grain qui initie la plasticité dans les deux modèles. Dans le cas de l'élasticité hétérogène, un système qui a un facteur de **Schmid** élevé peut être « protégé » par l'orientation du grain, faisant en sorte qu'il soit chargé selon une direction de faible module d'élasticité. On traite dans un premier temps un agrégat non texturé, souvent qualifié « d'isotrope ». La figure 3.3 montre les résultats obtenus respectivement dans les plans des contraintes de traction/traction et de traction/cisaillement pour une valeur de τ_c égale à $340\,\mathrm{MPa}$. L'intérêt de l'étude est alors de faire varier le coefficient d'anisotropie cubique du tenseur d'élasticité local entre une valeur de $2{,}8$ (trouvée pour les superalliages base nickel), de 1 qui représente le cas d'une élasticité locale isotrope (donc le modèle initial) jusqu'à une valeur de $0{,}7$.

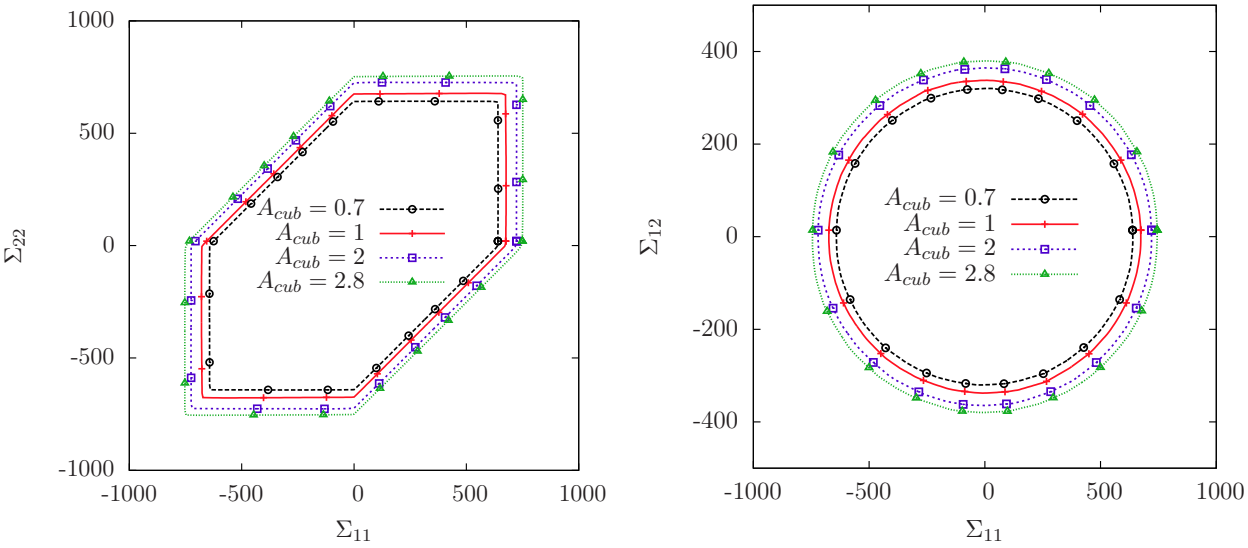


Figure 3.3 – *Surfaces de charge initiales dans les deux plans des contraintes traction/traction et traction/cisaillement avec $\tau_c = 340\,\mathrm{MPa}$ pour différentes valeurs du coefficient d'anisotropie cubique du tenseur d'élasticité local $A_{cub} = \dfrac{2C^g_{1212}}{C^g_{1111} - C^g_{1122}}$ (une valeur de 1 signifie que l'élasticité locale est isotrope).*

Pour le cas uniforme, on retrouve le critère de **Tresca** décrit dans la partie 2.2. En faisant augmenter l'hétérogénéité élastique, la fonction de charge consiste en une homothétie du critère

de **Tresca** de facteur positif ; c'est comme si τ_c avait une valeur plus élevée. On voit apparaître ainsi l'effet protecteur mentionné plus haut. Cela a déjà été remarqué par **Sauzay** [Sauzay, 2006]. On retrouve cette différence de seuil de plasticité macroscopique sur les calculs CPFE comme illustré dans [Cailletaud and Coudon, 2016]. Nous le verrons également dans la suite.

Toutefois, nous souhaitons attirer l'attention du lecteur sur une subtilité. Pour un calcul explicite et avec un comportement élastique hétérogène, un saut sur la déformation est provoqué à la frontière des grains par le changement de comportement mécanique. La conservation de l'équilibre sur les déplacements impose alors une redistribution des contraintes internes dans ces zones « frontières ». Par conséquent, un démarrage de la plasticité prématuré aura lieu : on parle souvent de microplasticité. Contrairement à ce qui a été dit précédemment, l'apparition du tout premier écoulement plastique se produit toujours plus tôt pour une élasticité hétérogène que pour le cas d'une élasticité homogène, à microstructure donnée. En général, cette microplasticité reste très localisée et malgré tout, le seuil de plasticité apparent sur la réponse moyennée sur un polycristal non texturé est plus élevé dans le cas d'une élasticité hétérogène. Les surfaces de charge tracées précédemment sont donc encore valides même si le domaine d'élasticité est construit sur des valeurs moyennes par phase cristallographique. Dans certains cas, ce traitement de la limite d'élasticité, basé uniquement sur des valeurs moyennes par phase cristallographique et qui ne tient pas compte des fluctuations intragranulaires, peut générer un biais. En particulier, on pourrait observer une surestimation du seuil de plasticité sur les modèles en champ moyen. Des travaux originaux proposent d'introduire un terme du second ordre, traduisant les fluctuations moyennes élastiques par phase (cela revient au calcul d'un tenseur de covariance élastique réalisé dans la partie 2.3), dans le critère de plasticité [Brenner et al., 2009]. La cission résolue n'est plus évaluée uniquement à partir de la contrainte moyenne du grain mais elle introduit également l'écart type de cette quantité calculé à partir du second moment du tenseur des contraintes locales. La loi de **Schmid** est modifiée en :

$$f^{s,g} = |\tau^{s,g}| + p\Delta_\tau^g - \tau_c \tag{3.30}$$

où $\Delta_\tau^g = \sqrt{\langle \tau_s^2 \rangle^g - \left(\tau^{s,g}\right)^2}$ et $\langle \tau_s^2 \rangle^g = \underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^{s,g} : \langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \otimes \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \rangle^g : \underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^{s,g}$.

Un nouveau paramètre p permet d'introduire la notion de « fraction volumique d'une phase cristallographique ayant plastifiée ». Le critère a été enrichi pour tester l'effet des fluctuations intra-phases élastiques sur la loi de **Hall-Petch** dans [Lavergne et al., 2013].

Pour conclure sur le cas d'un agrégat non texturé, les résultats sur les surfaces de charge ne sont pas alarmants puisqu'il suffit d'augmenter la valeur du seuil de plasticité (R_0 ou τ_c en fonction du modèle) pour traduire l'effet de l'hétérogénéité élastique. Comme l'identification de ce paramètre se fait sur des courbes expérimentales macroscopiques, l'effet est invisible. Cela n'est plus vrai lorsque le matériau s'est écroui. Pour les alliages DS, les conclusions sont différentes. La figure 3.4 représente les surfaces de charge pour les différents modèles et le critère de **Tresca**.

On observe des différences significatives entre les trois modèles, même lors d'un chargement simple en cisaillement transverse. Dans ce cas, augmenter le seuil ne suffira plus à conserver le caractère prédictif du modèle sur le début de l'écoulement plastique lors de chargements uniaxiaux et multi-axiaux.

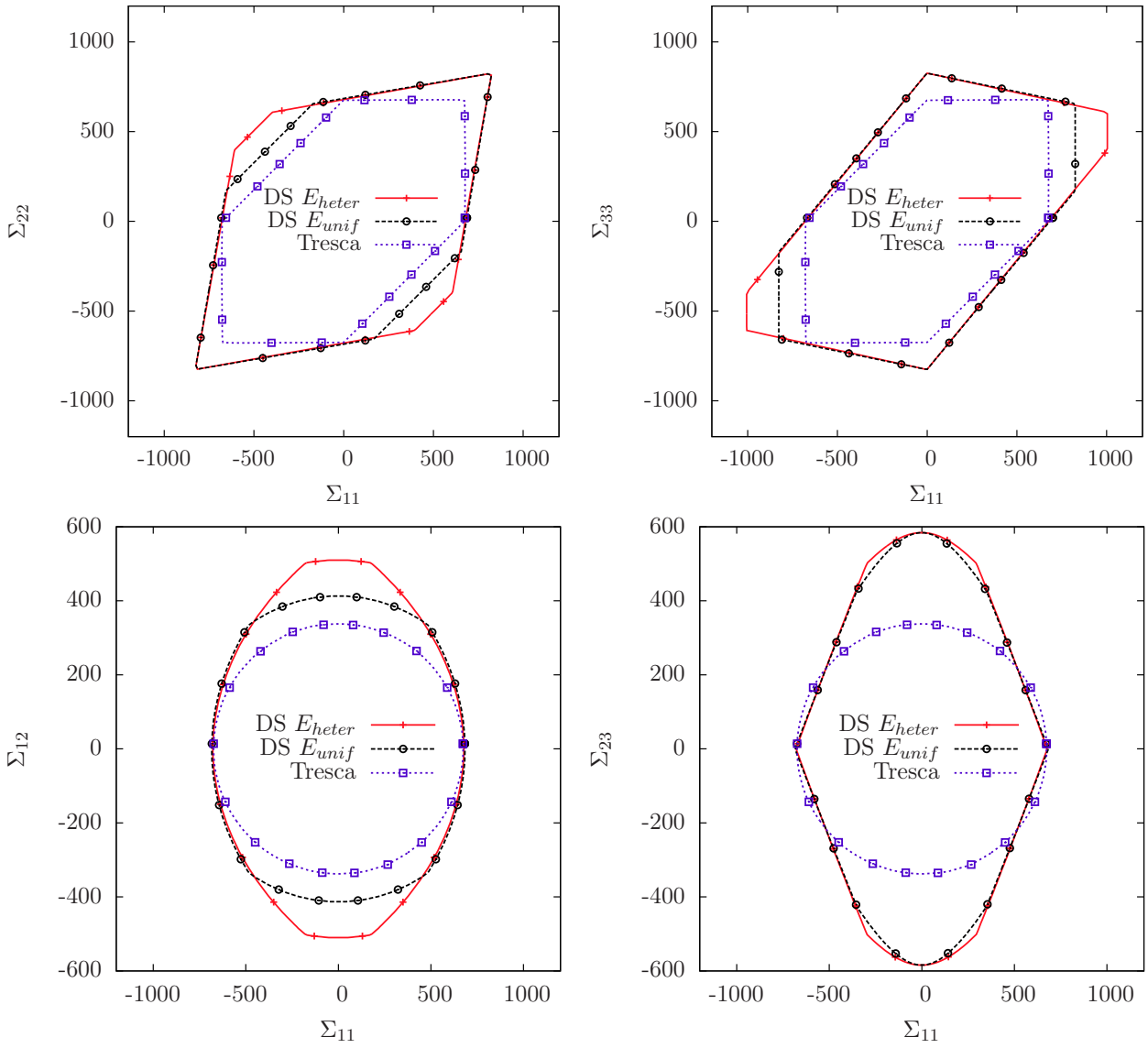


Figure 3.4 – *Surfaces de charge initiales dans quatre plans des contraintes (traction transverse)/(traction transverse), (traction transverse)/(traction longitudinale), (traction transverse)/(cisaillement transverse) et (traction transverse)/(cisaillement longitudinal) pour les deux types de transition d'échelles appliqués au cas DS : élasticité hétérogène (E_{heter}) et élasticité uniforme (E_{unif}) avec $\tau_c = 340\,\mathrm{MPa}$.*

Quelques calculs pour le cas d'un agrégat non texturé

Les résultats présentés dans cette partie sont issus du travail de **Gentieu** lors d'un stage au Centre des Matériaux, MINES ParisTech [Gentieu, 2015]. Un objectif était de vérifier les réponses macroscopiques obtenues avec la formulation hétérogène du modèle en β, en les comparant à des calculs CPFE. Les paramètres matériau utilisés sont donnés dans le tableau 3.1.

C_{1111}	C_{1122}	C_{1212}	K	n
90 300 MPa	45 150 MPa	63 200 MPa	50 MPa $s^{1/n}$	20
τ^c	Q	b	C	D
200 MPa	100 MPa	10	30 000 MPa	150

Table 3.1 – *Paramètres utilisés pour la loi de comportement locale afin d'effectuer des calculs en champ complet et en champ moyen sur un agrégat non texturé ($H_{ij} = 1$ pour la matrice d'interaction entre les systèmes de glissement).*

La mise en données du calcul en champ complet utilise des conditions aux limites périodiques définies à l'aide d'éléments enrichis par trois nouveaux degrés de liberté (déjà abordé dans le chapitre 2). On peut ainsi imposer, comme dans le chapitre 2, des conditions aux limites mixtes. Afin d'assurer une bonne précision sur la réponse macroscopique en champ complet, les calculs sont réalisés en utilisant 600 grains (des tentatives jusqu'à 1000 grains ont montré que cela était suffisant). Pour définir des quantités par phase, la tâche est plus difficile puisque les trois angles d'**Euler** sont pris aléatoirement pour les 600 grains selon :

$$\begin{cases} \phi_1 \in [0, 360] \\ \phi_2 \in [0, 360] \\ \Phi = \frac{180}{\pi} \arccos(2u - 1) \text{ avec } u \in [0, 1] \end{cases}$$

La méthode utilisée pour construire chaque réalisation consiste à redistribuer aléatoirement les mêmes 600 orientations cristallographiques dans l'agrégat. Dans chaque réalisation, on retrouve donc une fois chaque orientation cristallographique mais assignée à un grain différent. La représentativité des résultats obtenus à ce niveau requiert alors un nombre important de réalisations contrairement au cas DS où plusieurs avatars étaient présents dans une réalisation. La figure 3.5 montre la modélisation EF servant de référence afin d'évaluer l'efficacité du modèle en β proposé.

En réalité, l'agrégat contient 200 grains. On suppose une équivalence entre trois calculs CPFE sur un agrégat contenant 200 grains et un calcul sur un agrégat à 600 grains, du moins sur les moyennes globales et par phase cristallographique. L'avantage est de pouvoir lancer trois calculs indépendants en parallèle. Sur la figure 3.6, les réponses globales moyennes des trois calculs pour une élasticité locale isotrope ou cubique sont comparées à celles obtenues pour le modèle en β supposant une élasticité uniforme ou hétérogène à l'échelle locale.

Pour la règle en β, un paramètre d'accommodation D scalaire est utilisé et identifié dans le cas d'une élasticité isotrope. Pour une élasticité cubique locale, ce paramètre devient un tenseur avec une symétrie cubique et est exprimé dans le repère cristallographique. L'écart dont il a été fait mention dans la partie précédente sur le seuil de plasticité se vérifie aisément sur les réponses macroscopiques. En particulier, ce phénomène est aussi présent sur les simulations

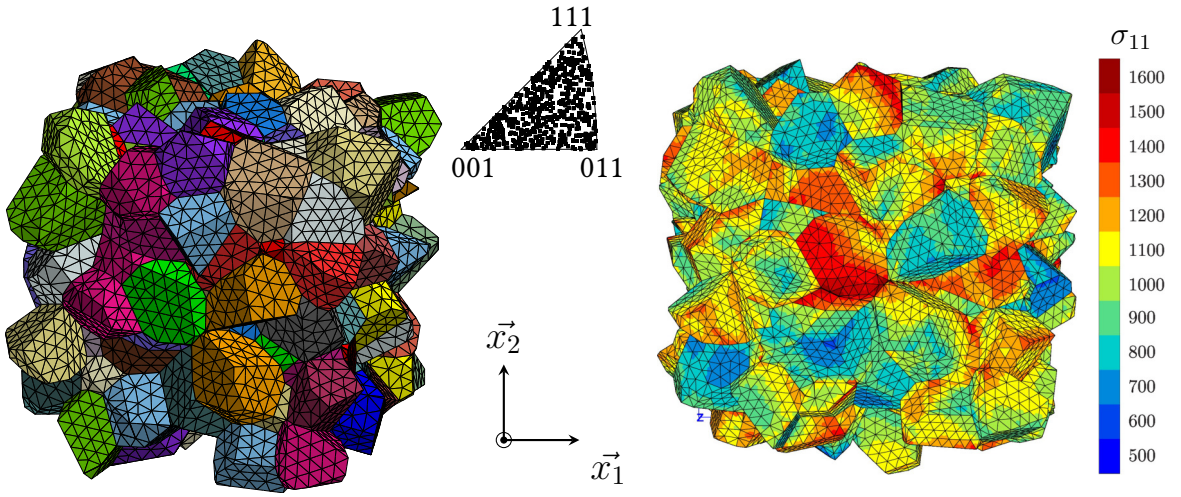
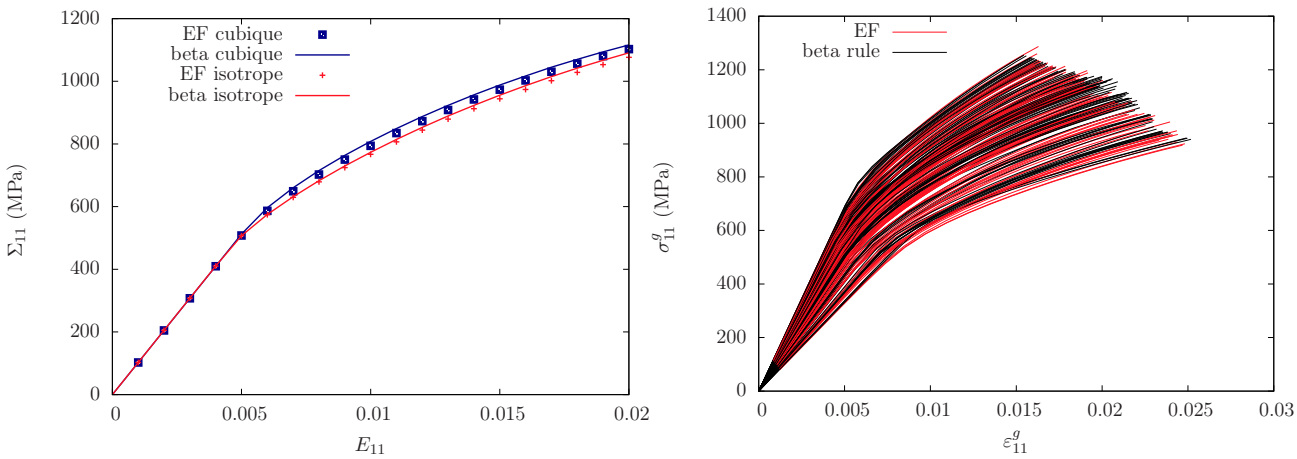


Figure 3.5 – *Agrégat synthétique sans texture cristallographique apparente utilisé pour un calcul CPFE en traction simple dans la direction $\vec{x}_1$: $E_{11} = 0.02$ et $\dot{E}_{11} = 10^{-3}$ s^{-1}.*



a. b.

Figure 3.6 – *a. Comparaison des réponses globales obtenues avec une modélisation en champ complet ou en champ moyen en supposant une élasticité locale isotrope (i.e. uniforme) ou cubique et b.* 200 *réponses par phase cristallographique pour les composantes σ^g_{11} et ε^g_{11}.*

en champ complet. La figure 3.7 compare d'une part les réponses locales pour une élasticité isotrope ou cubique à l'échelle des grains et d'autre part, l'effet de la loi d'évolution de $\underset{\sim}{\beta}^g$ sur les réponses locales.

On remarque que la différence de comportement entre élasticité isotrope et élasticité cubique ne se limite pas au seuil, le module apparent d'écrouissage est également différent pour certaines phases cristallographiques. Pour les phases dont le module d'élasticité dans le cas hétérogène est supérieur au module effectif, le module d'écrouissage dans le cas uniforme est supérieur à celui du cas hétérogène. Finalement, nous avons tendance à penser que la valeur de la contrainte, sous-estimée en plasticité commençante dans le cas uniforme, va « rattraper » la réponse du cas hétérogène dans le domaine d'un écoulement plastique saturant. Lorsque la déformation plastique devient grande vis-a-vis de la partie élastique, la différence sur les contraintes/déformations locales pour les deux types d'élasticité tend à s'effacer : les fuseaux

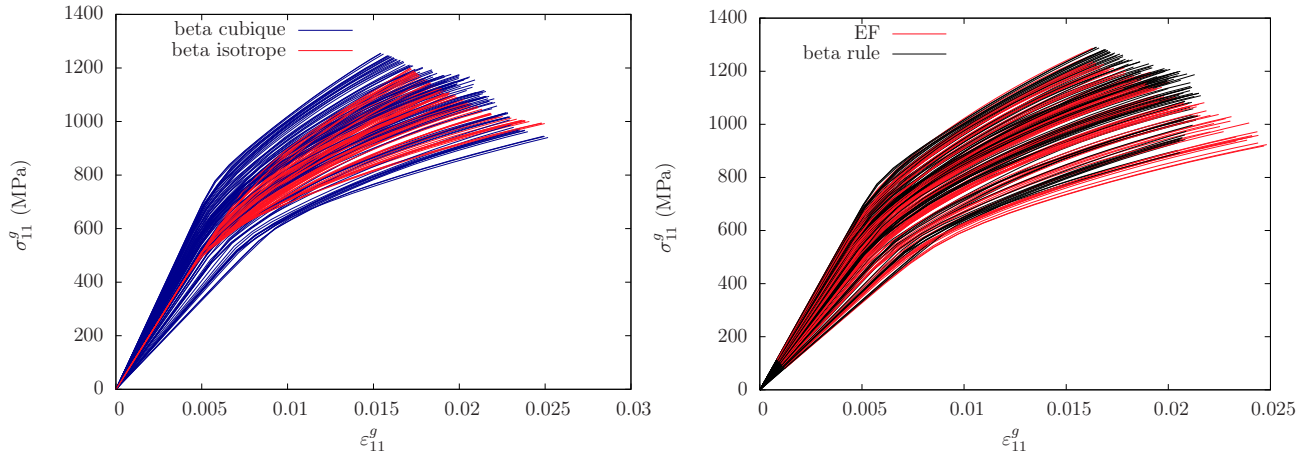


Figure 3.7 – *a. Comparaison de* 200 *réponses locales obtenues avec la règle en* β *en utilisant une élasticité locale isotrope (*$i.e.$ *uniforme) ou cubique et b.* 200 *réponses locales pour les calculs CPFE avec élasticité cubique et la règle en* β *supposant un paramètre d'accommodation* D *scalaire.*

de courbes par phase cristallographique se superposent.

Deux idées ont été discutées précédemment sur la forme du tenseur $\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}$ pour la loi d'évolution de $\boldsymbol{\beta}^{\boldsymbol{g}}$. **Sai et al** proposent que ce tenseur ait la même symétrie que le MHE [Sai et al., 2006], donc isotrope. Comme la trace de cette variable interne est nulle, le tenseur $\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}$ peut être ramené à un simple scalaire D. Pour ce qui nous concerne, nous avons proposé d'exprimer $\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}^g$ avec la même symétrie que le tenseur d'élasticité du grain, dans le repère cristallographique. Pour une élasticité isotrope, cette seconde hypothèse est équivalente à la première, et conduit à n'introduire qu'un scalaire, alors que $\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}$ reste sous la forme d'un tenseur d'ordre 4 pour le cas cubique. La figure 3.6.b montre un accord convenable avec un tenseur $\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}^g$ cubique alors que les réponses sont moins bonnes avec un simple D scalaire, sur la figure 3.7.b.

3.2 Analyse des réponses mécaniques en champ moyen et en champ complet pour un alliage DS

Avant de proposer un calibrage du modèle en β avec des résultats expérimentaux obtenus pour le DS200, nous avons vérifié le potentiel du modèle par rapport à d'autres approches, le KBW en élasticité hétérogène (KBW) et le modèle à champ translaté de **Sabar** (CT). En particulier, il faut lever le doute sur l'efficacité du modèle pour une viscosité non négligeable. Les modèles sont comparés dans une première partie à des calculs de référence en champ complet pour différents trajets de chargement. Par la suite, seule la règle en β est évaluée sur des trajets cycliques. Le cadre de travail pour les calculs de référence en champ complet décrit dans la partie 2.1 est adopté en prenant le cas Voro-N. Nous proposons de rester dans un domaine de comportement local réaliste vis-à-vis du matériau étudié. Pour cela, la loi de comportement est identifiée sur des essais de traction dans la direction longitudinale pour l'alliage DZ125 (un superalliage à base nickel DS proche du René 125 DS) à 650 °C dont la caractérisation mécanique est présentée dans [Dong et al., 2014]. Les données matériau sont fournies dans le tableau 3.2.

C_{1111}	C_{1122}	C_{1212}	K	n
190 200 MPa	110 770 MPa	118 500 MPa	150 MPa	16
τ^c	Q	b	C	D
240 MPa	30 MPa	100	100 000 MPa	5 000

Table 3.2 – *Paramètres identifiés pour la loi de comportement locale à partir des essais cités dans [Dong et al., 2014] sur le superalliage DZ125 à* 650 °C.

La comparaison des essais expérimentaux avec le modèle sur les chargements longitudinaux qui ont servi à une identification des paramètres est présentée sur la figure 3.8.

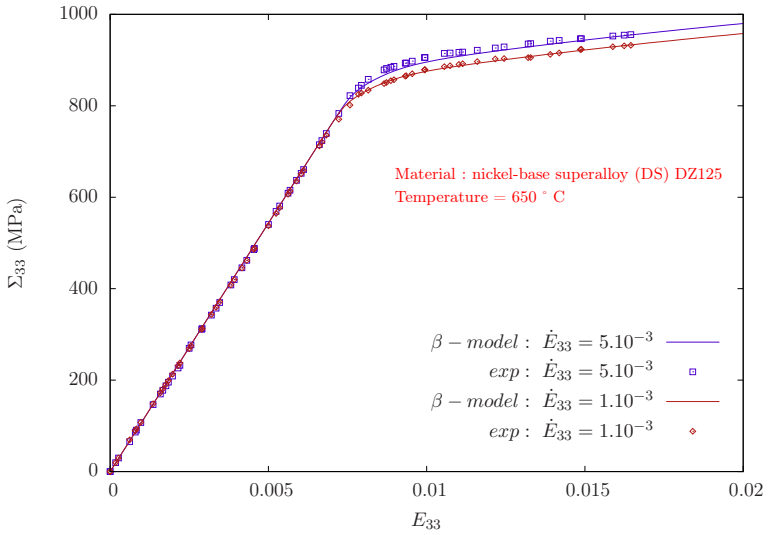


Figure 3.8 – *Confrontation du modèle en β avec les essais issus de [Dong et al., 2014] pour un chargement en traction monotone dans la direction longitudinal de l'alliage DS à* 650 °C.

En complément des calculs réalisés avec ces paramètres, nous mènerons, pour certains chargements, des études de sensibilité pour exacerber des effets non visibles avec les valeurs proposées (plus de viscosité en traction, plus de durcissement cyclique, ...).

3.2.1 Chargements transverses monotones

Traction uniaxiale

Les réponses mécaniques pour une traction monotone dans la direction transverse $\vec{x}_1$ sont étudiées pour une déformation globale $E_{11} = 0{,}02$ et une vitesse $\dot{E}_{11} = 10^{-5}\,\mathrm{s}^{-1}$. Les conditions aux limites sont mixtes avec toutes les composantes du tenseur des contraintes global $\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}$ nulles sauf Σ_{11}. La viscosité n'est pas négligeable. On peut quantifier son effet par une estimation (borne supérieure) de la contrainte visqueuse au moyen de la vitesse de déformation totale $\Sigma_v = \sqrt{6}K(\frac{8}{\sqrt{6}}\dot{E}_{11})^{\frac{1}{n}} = 193\,\mathrm{MPa}$, à comparer avec la cission résolue critique ($\tau_c = 240\,\mathrm{MPa}$). La réponse macroscopique pour les trois modèles en champ moyen (KBW, CT, β) est comparée avec douze réalisations CPFEM sur la figure 3.9.

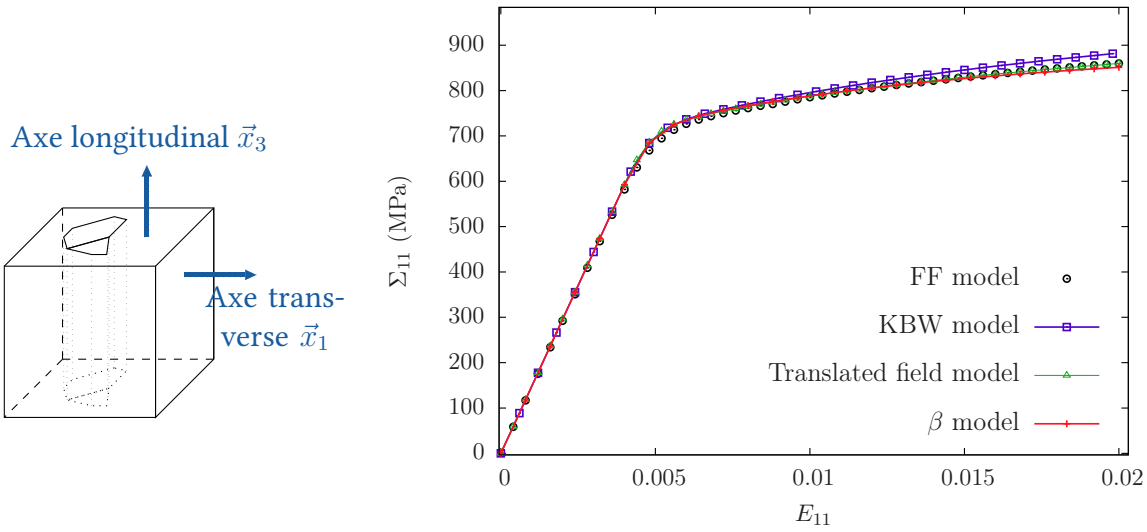


Figure 3.9 – *Réponse macroscopique à un chargement en traction simple dans la direction $\vec{x}_1$ pour différents modèles en champ moyen et le calcul en champ complet (FF model).*

Nous remarquons une bonne estimation pour les trois modèles face à la référence. Classiquement, le KBW prévoit un module d'écrouissage « du polycristal » un peu plus élevé, qui le conduit à surestimer de plus en plus la contrainte au cours de l'écoulement plastique. Pour la règle en β, les paramètres D_{1111} et D_{1212} sont modifiés dans la procédure d'identification. Il faut également analyser les estimations locales proposées par les modèles. Pour les calculs en champ complet, on montre que 12 réalisations suffisent pour avoir des quantités par phase avec une erreur inférieure à $1\,\%$. La figure 3.10 compare l'évolution de toutes les composantes non nulles des tenseurs des contraintes et des déformations locales pour la règle en β et les calculs CPFE.

On observe de bonnes estimations à la fois pour la composante principale de chargement mais aussi pour les composantes résiduelles issues de l'effet de voisinage. Ceci est en partie lié au fait que l'identification des deux paramètres pour la règle en β a été réalisée en prenant justement en compte le recalage de ces contraintes locales, en plus de la réponse macroscopique. L'utilisation de ces informations locales permet d'ailleurs de lever une certaine indétermination des jeux de paramètres. Nous avons observé que certains jeux de paramètres peuvent donner une excellente réponse macroscopique, mais une mauvaise estimation locale. Nous avons alors choisi un couple de valeurs qui donne la réponse optimale aux deux échelles. D'autre part, la ligne de zéros introduite dans le tenseur $\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}$ permet d'obtenir une déformation uniforme dans tous les grains pour la direction longitudinale, comme stipulé en 3.1.

Ensuite, il est inhabituel d'observer cette évolution de la déformation ε_{11}^g en fonction de l'orientation cristallographique en fin de chargement. On discerne une déformation minimale pour les grains avec ϕ_1 proche de $45°$ (phases cristallographiques avec la plus forte contrainte). Puis une augmentation de la déformation pour les réponses locales avec un plus faible niveau de contrainte, et puis à nouveau une diminution de cette déformation qui est, elle, pas commune. Ce phénomène est induit par l'effet couplé de l'hétérogénéité élastique et plastique. La phase cristallographique ayant un $\phi_1 = 0\,°$ possède le module apparent élastique le plus faible mais également un facteur de **Schmid** faible (égal à $\frac{1}{\sqrt{6}}$ en traction simple). De l'autre côté, la phase cristallographique avec $\phi_1 = 22{,}5\,°$ possède un facteur de **Schmid** plus élevé (égal à $0{,}493$ en traction simple). Son module apparent étant plus élevé, les réponses des deux phases cristal-

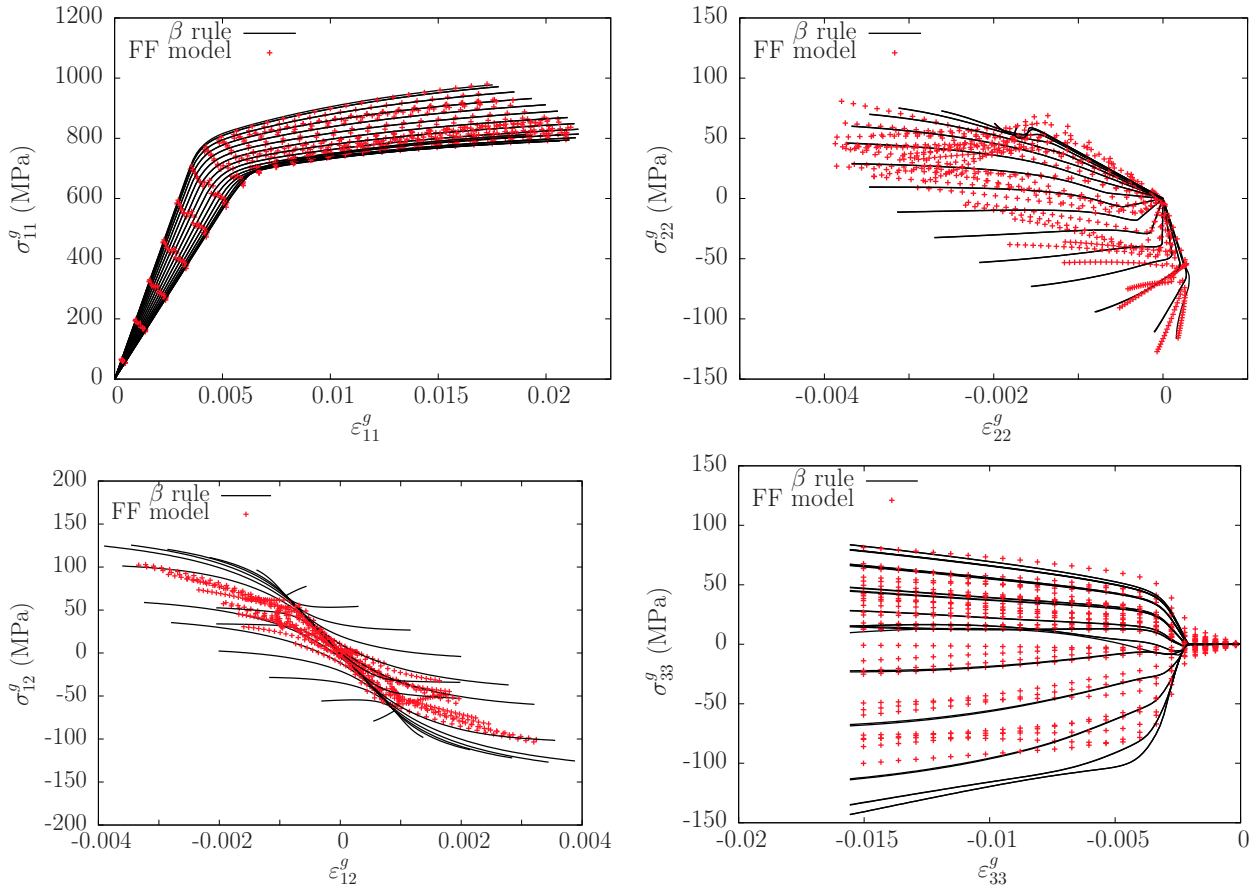


Figure 3.10 – *Réponses moyennes par phase cristallographique pour un chargement en traction simple dans la direction $\vec{x}_1$. Comparaison de 12 simulations CPFE et de la règle en β.*

lographiques vont se croiser en plasticité commençante. Ainsi pour une déformation globale de 2 %, la phase cristallographique avec $\phi_1 = 0\,^\circ$ va à la fois avoir une contrainte plus élevée que la phase avec $\phi_1 = 22{,}5\,^\circ$ à cause de son facteur de **Schmid** et va également avoir une déformation plus élevée parce qu'elle a un module apparent élastique plus faible. Ce dernier point n'était pas visible avec une formulation des modèles faisant l'hypothèse d'une élasticité uniforme. Mentionnons également que ce « croisement » de certaines réponses contraintes/-déformations locales est amplifié dans le cas indépendant du temps et tend à s'effacer lorsqu'on augmente la contribution visqueuse. Nous rediscuterons dans la suite des effets de la viscosité.

La figure 3.11 compare deux estimations locales sur la composante principale et de cisaillement pour les deux autres modèles micromécaniques.

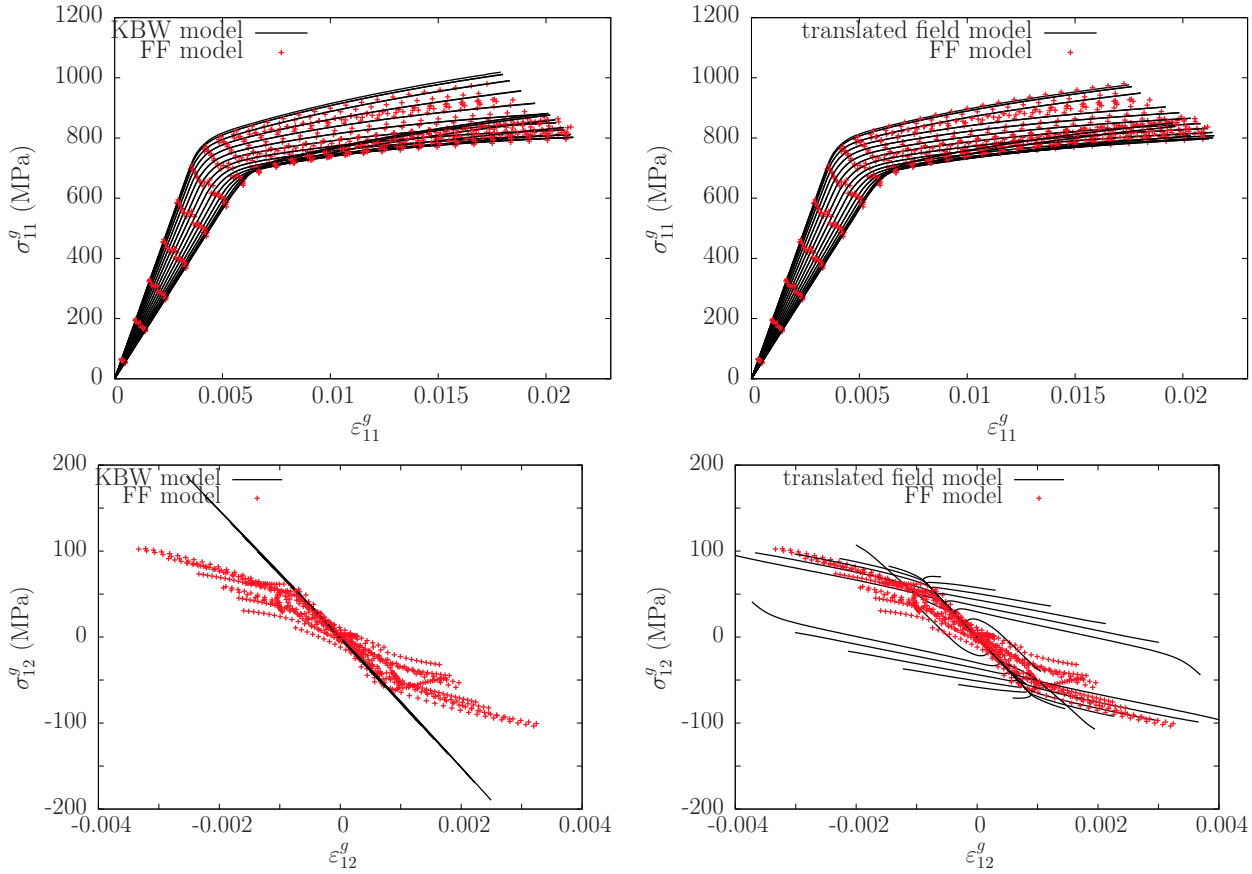


Figure 3.11 – *Réponses moyennes par phase cristallographique pour un chargement en traction simple dans la direction $\vec{x}_1$. Comparaison de 12 simulations CPFE et des modèles KBW et CT.*

Pour le modèle KBW, la pente d'accommodation élastique est observée en fin de chargement et correspond bien au module de cisaillement μ. A ce niveau de déformation, qui reste relativement faible, les estimations locales restent néanmoins cohérentes avec la référence. Pour la composante de cisaillement, l'accord est significativement moins bon. Cela découle directement d'une accommodation purement élastique qui ne présente pas de couplage traction/cisaillement (sous-matrice 3x3 nulle dans le tenseur d'élasticté effectif). Ainsi, le comportement pour la composante de cisaillement reste linéaire élastique (de même module pour chaque phase) contrairement à la référence. Pour le modèle à champ translaté, de meilleurs résultats sont observés même si l'évolution de la déformation de cisaillement est surprenante pour

certaines orientations cristallographiques. Pour avoir une vue synthétique quantitative des prévisions pour chaque modèle, la valeur finale de la contrainte et de la déformation est tracée en fonction de la référence obtenue en éléments finis (voir la figure 3.13.a,c). L'erreur maximale est alors de $6\,\%$ avec une meilleure prédiction pour le modèle CT. Pour la règle en β, la contrainte pour les phases cristallographiques avec un ϕ_1 proche de $0°$ est sous-estimée par rapport à la référence CPFE. Cela va découler de la façon dont les coefficients D_{1111} et D_{1212} ont été choisis pour retranscrire le « croisement » des grains avec un fort facteur de **Schmid** et ceux avec un module apparent élastique faible. En particulier, le paramètre D_{1212} semble permettre d'ajuster l'amplitude du croisement des courbes. Ce paramètre est également utilisé pour recaler convenablement les courbes locales pour un chargement en cisaillement pur. Un compromis est donc à faire. Pour les déformations locales, on remarque de bonnes prévisions pour le modèle en β, avec des valeurs superposées avec celles du modèle CT, sauf pour les phases cristallographiques avec ϕ_1 proche de $0°$.

Comme discuté précédemment, la viscosité n'est pas traitée de manière rigoureuse dans les trois modèles avec des hypothèses plus ou moins fortes (voir le chapitre 2). La même comparaison est alors menée en augmentant la vitesse de chargement à $10^{-4}\,\mathrm{s}^{-1}$ et en modifiant les paramètres de la loi puissance K, n en $2000\,\mathrm{MPa\,s}^{\frac{1}{n}}$ et 4 (Σ_v est alors de l'ordre de $600\,\mathrm{MPa}$). La réponse globale pour chaque modèle est représentée sur la figure 3.12.

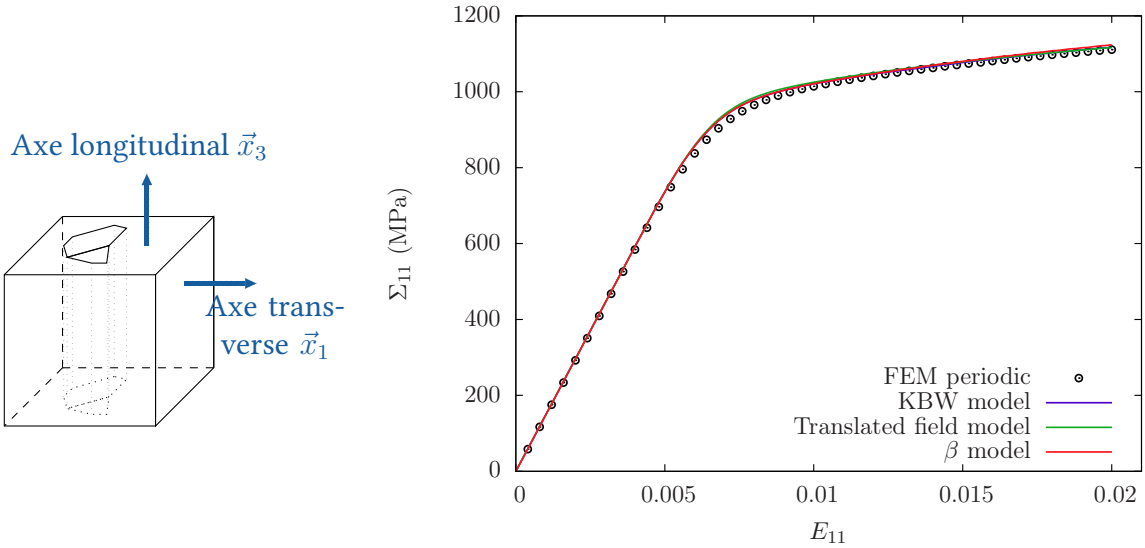


Figure 3.12 – *Réponse globale pour un chargement en traction transverse monotone dans la direction $\vec{x}_1$ pour les différents modèles avec une part visqueuse plus importante (HV : K = $2000\,\mathrm{MPa\,s}^{\frac{1}{n}}$; n=4 ; $\dot{E}$=$1 \times 10^{-4}\,\mathrm{s}^{-1}$).*

Les résultats sont très proches de la référence CPFE, indépendamment de la transition d'échelle choisie puisqu'il y a moins de $1\,\%$ d'erreur sur les valeurs finales des contraintes et déformations macroscopiques. Les valeurs finales pour chaque orientation sont reportées en Fig. 3.13.b,d en fonction de la référence obtenue par éléments finis. Les erreurs sont plus faibles que lorsque la viscosité était moins importante et rentrent dans les bornes tracées de $\pm 5\%$. La viscosité semble donc bénéfique pour les prévisions du modèle.

Il apparaît que la viscosité peut réduire le contraste entre les phases et par conséquent les interactions entre les grains. Afin de valider cette hypothèse, nous calculons un écart-type

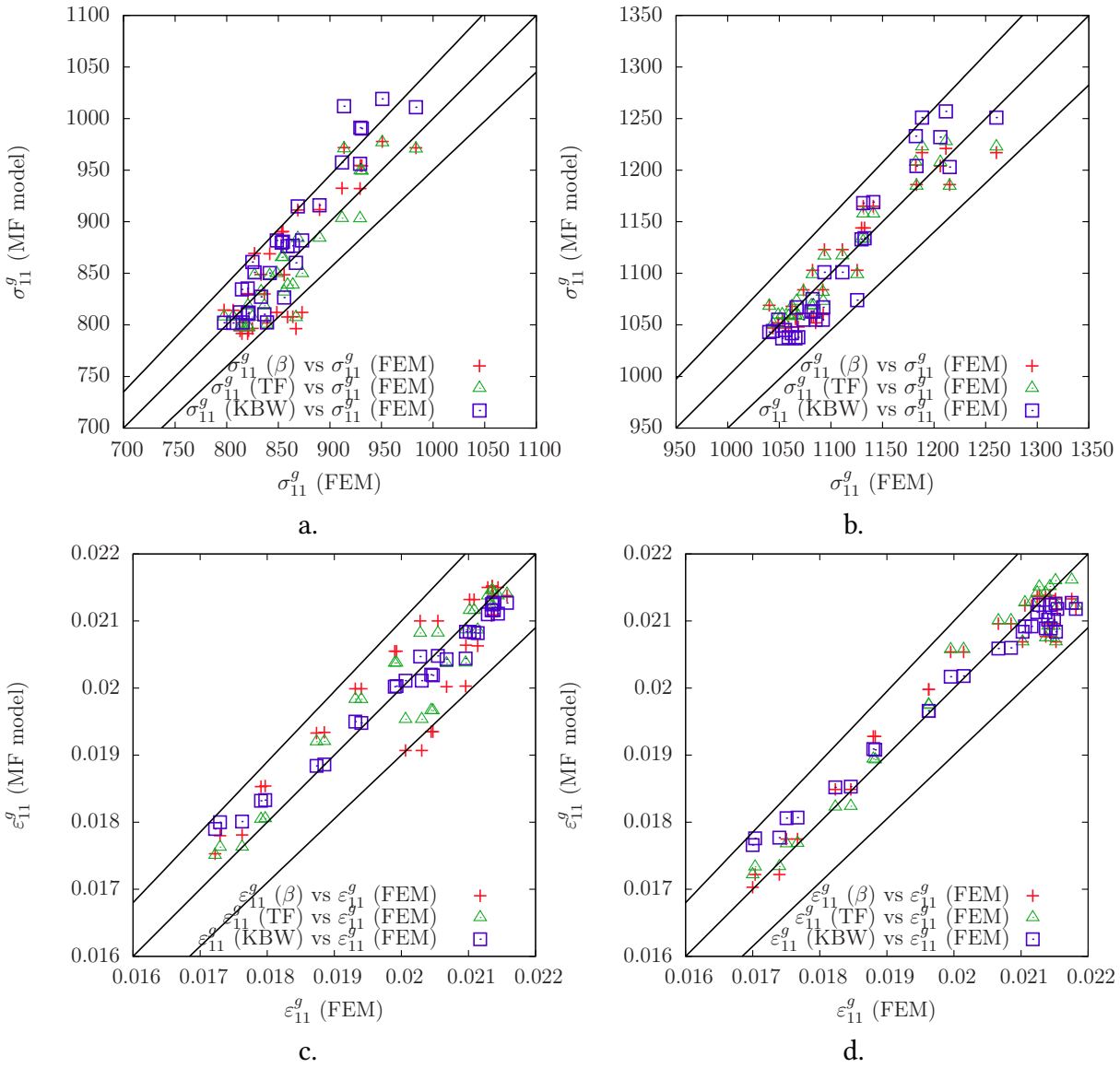


Figure 3.13 – *Comparaisons des valeurs finales de la contrainte σ^g_{11} (a. et b.) et de la déformation ε^g_{11} (c. et d.) en traction uniaxiale pour chaque phase cristallographique entre chaque modèle MF et la référence CPFE pour une faible viscosité (a. et c.) et une forte viscosité (b. et d.). Les lignes correspondent à une erreur de $\pm 5\%$.*

normé (comme proposé dans la partie 2.1) à chaque incrément de temps et pour les cas d'une faible et d'une forte viscosité (voir la figure 3.14).

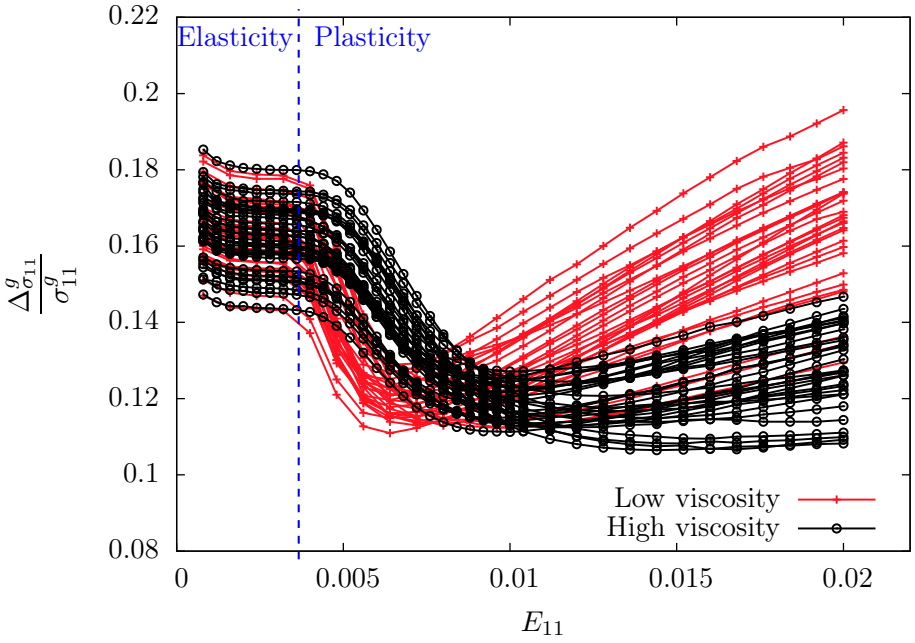


Figure 3.14 – *Ecart-type de la composante "11" du tenseur des contraintes $\sigma_{11}(x)$ moyenné pour chaque orientation en fonction de la déformation macroscopique appliquée E_{11} lors d'une traction uniaxiale.*

Comme discuté précédemment, douze réalisations ne suffisent pas à avoir une estimation quantitative pour l'écart-type ; nous étudions ici uniquement des tendances. Les deux calculs possèdent bien entendu le même écart-type en élasticité. Une transition bien marquée est observée au début de l'écoulement plastique, avec une chute plus brutale dans le cas à faible viscosité. En fin de chargement, la fluctuation au sein d'une phase est plus faible dans le cas à forte viscosité. Si les fluctuations intra-phases sont plus faibles, cela peut signifier que l'influence de l'entourage est moins forte. La question qui reste ouverte est de savoir si les valeurs obtenues pour le cas à forte viscosité rattrapent celles de la faible viscosité pour une déformation plus importante. Si c'était le cas, la conclusion serait que la viscosité modère l'effet des interactions entre grains. Pour examiner ce point avec les trois modèles, il faudrait imposer une déformation globale deux à trois fois plus grande.

Cisaillement uniaxial

L'identification de la composante D_{1122} de la règle en β est effectuée grâce à un chargement de cisaillement pur. Les conditions sont donc $E_{12} = 0.02$ pour une vitesse constante de $\dot{E}_{12} = 10^{-5}$ s^{-1}. Comme précédemment, les autres composantes du tenseur des contraintes macroscopiques sont prises nulles. Cette fois, 20 réalisations CPFE sont utilisées pour construire les quantités moyennes. Les réponses globales pour les différents modèles sont présentées sur la figure 3.15.

L'aspect phénoménologique de la règle en β donne l'opportunité de trouver une réponse plus souple que les autres modèles et ainsi de rattraper la surévaluation de la limite d'élasticité. Les valeurs des 3 paramètres utilisées pour l'évolution du jeu de variables internes $\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^g$ sont

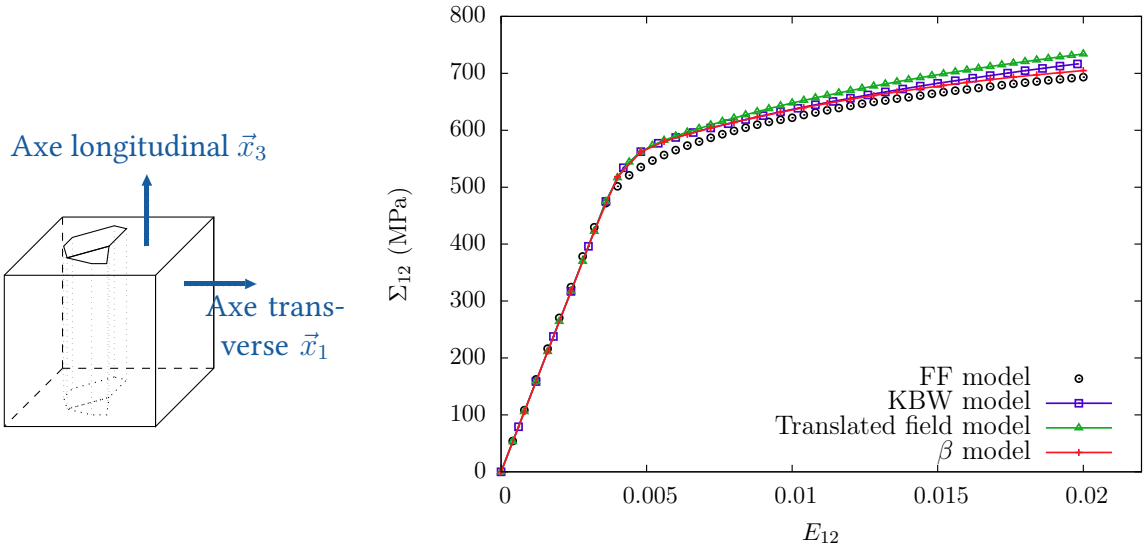


Figure 3.15 – *Réponse globale pour un chargement de cisaillement pur transverse pour les différents modèles en champ complet ou en champ moyen.*

présentées dans le tableau 3.3.

	D_{1111}	D_{1122}	D_{1212}
Faible viscosité	180	80	100
Forte viscosité	130	40	70

Table 3.3 – *Valeurs du tenseur $\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}$ utilisées dans les cas faible et forte viscosité.*

L'analyse des réponses locales (figure 3.16) montre un fort contraste entre les modules apparents élastiques des différentes phases cristallographiques. Ce contraste doit rendre les fluctuations non négligeables au sein d'un grain.

La surestimation générale peut être attribuée à la microplasticité. Une façon de traiter ce problème consiste à rajouter un terme du second ordre dans le critère d'élasticité comme proposé dans [Brenner et al., 2009]. Une autre interprétation peut également être proposée. Les grains ayant un faible module apparent (ϕ_1 proche de $45°$) ont en effet aussi une limite d'élasticité plus faible. Ils vont donc développer rapidement de la déformation plastique. Dans ce cas, le tenseur tangent élastoplastique effectif $\underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff}$ qui a été remplacé par le tenseur purement élastique $\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff}$ dans la règle en β, peut devenir suffisamment différent de ce dernier. Finalement, l'hypothèse $\underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff} \approx \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff}$ n'est plus vérifiée. Ainsi, les grains qui ont un module apparent plus élevé et un facteur de **Schmid** plus faible, et qui n'ont donc pas encore atteint leur domaine de plasticité peuvent avoir une réduction de leur module apparent par la contribution combinée de $\underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g} : \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{eff\,-1} : \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\Sigma}}}$ et $\underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{g} : \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{*} : \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{E}}}^{p}$. Par conséquent, une redistribution de la contrainte s'opère également entre les grains « plastifiés » et ceux qu'ils ne le sont pas encore. On peut cibler les orientations « trop raides » dans les modèles homogènes en regardant les valeurs finales en contrainte et déformation (voir la figure 3.17).

L'accommodation linéaire du modèle KBW est trop raide et entraîne une erreur sur la déforma-

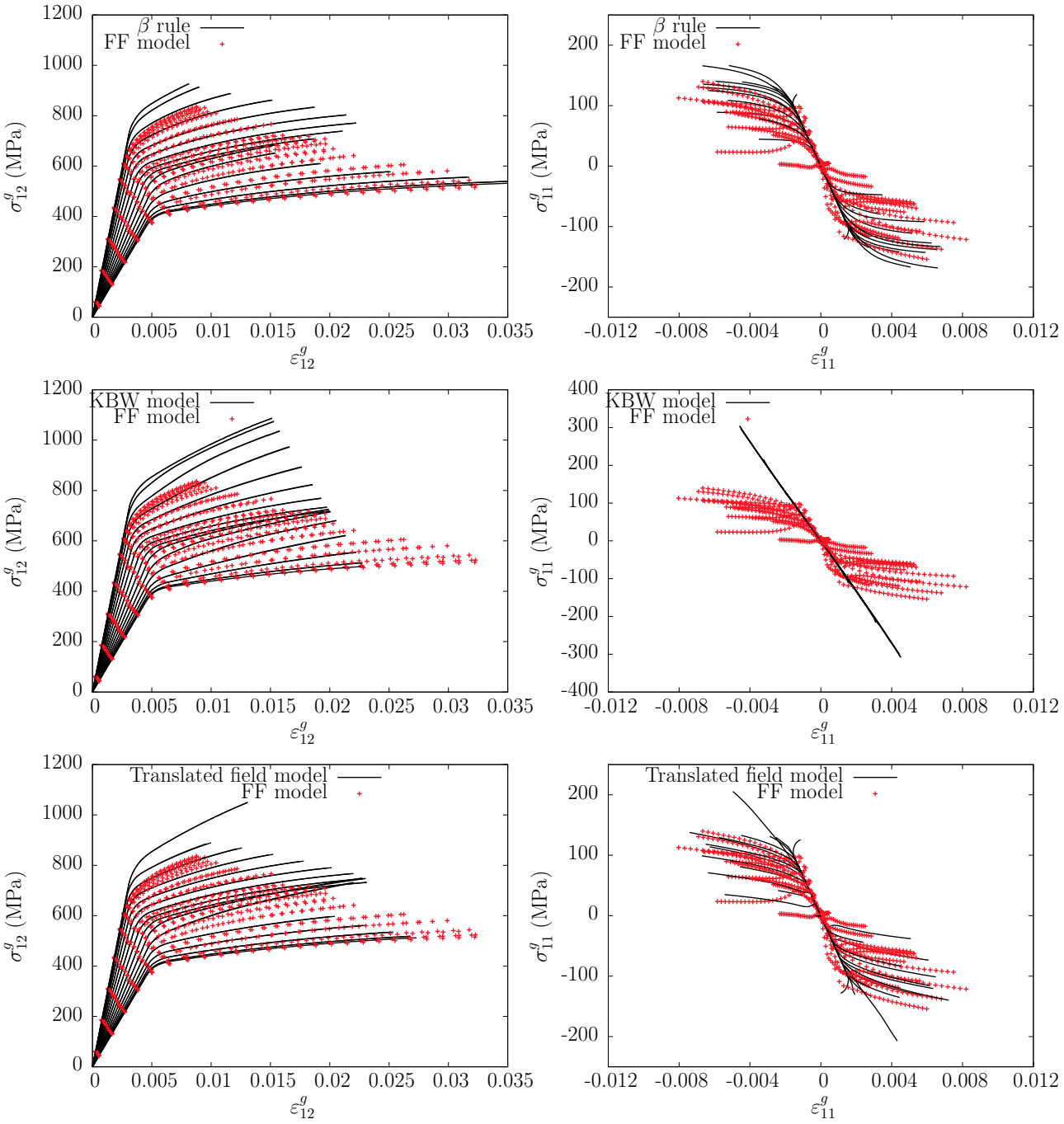


Figure 3.16 – *Réponse locale moyennée par phase cristallographique pour 12 réalisations FECP et les modèles en champ moyen en cisaillement pur.*

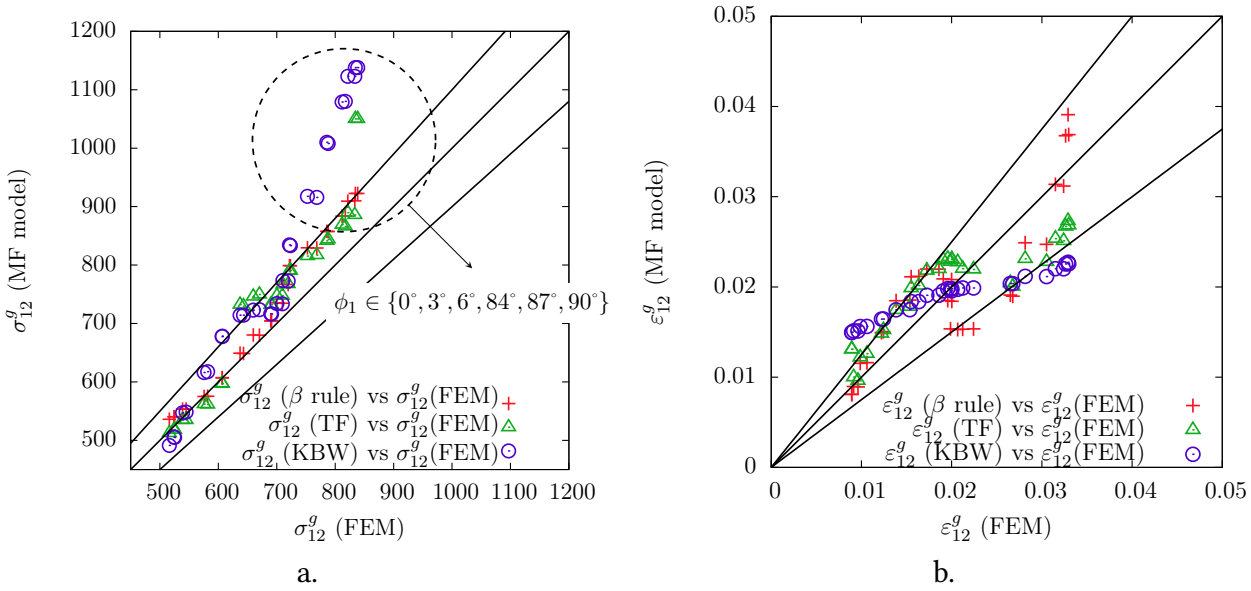


Figure 3.17 – *Comparaisons des valeurs finales de la contrainte σ^g_{12} (a.) ou de la déformation ε^g_{12} (b.) pour chaque orientation lors d'un chargement en cisaillement pur.*

tion supérieure à 15% pour les phases cristallographiques avec ϕ_1 proche de $0\,°$ (déformation surestimée) et $45\,°$ (déformation sous-estimée). La réponse locale pour les composantes 11 et 22 est symétrique ; on n'en a donc tracé qu'une seule. De bonnes estimations sont obtenues avec la règle en β et le modèle CT. Comme en traction, la non prise en compte des couplages traction/cisaillement entraîne des erreurs avec le modèle KBW.

En conclusion, les deux chargements effectués ont permis de voir les différents défauts de chaque modèle. L'extension de la règle en β semble bénéfique sur les réponses globales et locales générées en comparaison à l'étude précédente dans [Martin et al., 2014, Martin, 2012]. Des résultats de cisaillement dans la direction longitudinale ont été analysés. Les calculs CPFE sont plus coûteux puisqu'il est nécessaire de raffiner le nombre d'éléments dans l'épaisseur.

3.2.2 Chargements cycliques uniaxiaux ou biaxiaux

Dans cette partie, des chargements plus complexes sont étudiés. Le but recherché est d'étudier les prévisions fournies par la règle en β pour des sollicitations cycliques (durcissement, phénomène de rochet, ...). La référence sera de nouveau établie à l'aide de douze calculs CPFE. Nous avons vérifié que le nombre de réalisations nécessaires n'est pas modifié pour un même chargement si on réalise des cycles ou une traction monotone.

Traction transverse uniaxiale avec un ratio cyclique en déformation $R_\varepsilon = -1$

Les conditions aux limites restent les mêmes que pour la traction monotone de la partie précédente. Le chargement se limite à cinq cycles puisque nous sommes intéressés par l'évolution du durcissement cyclique, et que ceci suffit pour atteindre le cycle stabilisé. La figure 3.18 compare le modèle en β aux résultats CPFE pour les paramètres de l'écrouissage isotrope précédent et pour un jeu modifié, qui génère un fort écrouissage cyclique ($Q = 200\,\mathrm{MPa}$ et $b = 10$) (Fig. 3.18).

Dans les deux cas, on remarque une bonne corrélation entre les deux modèles. Les réponses

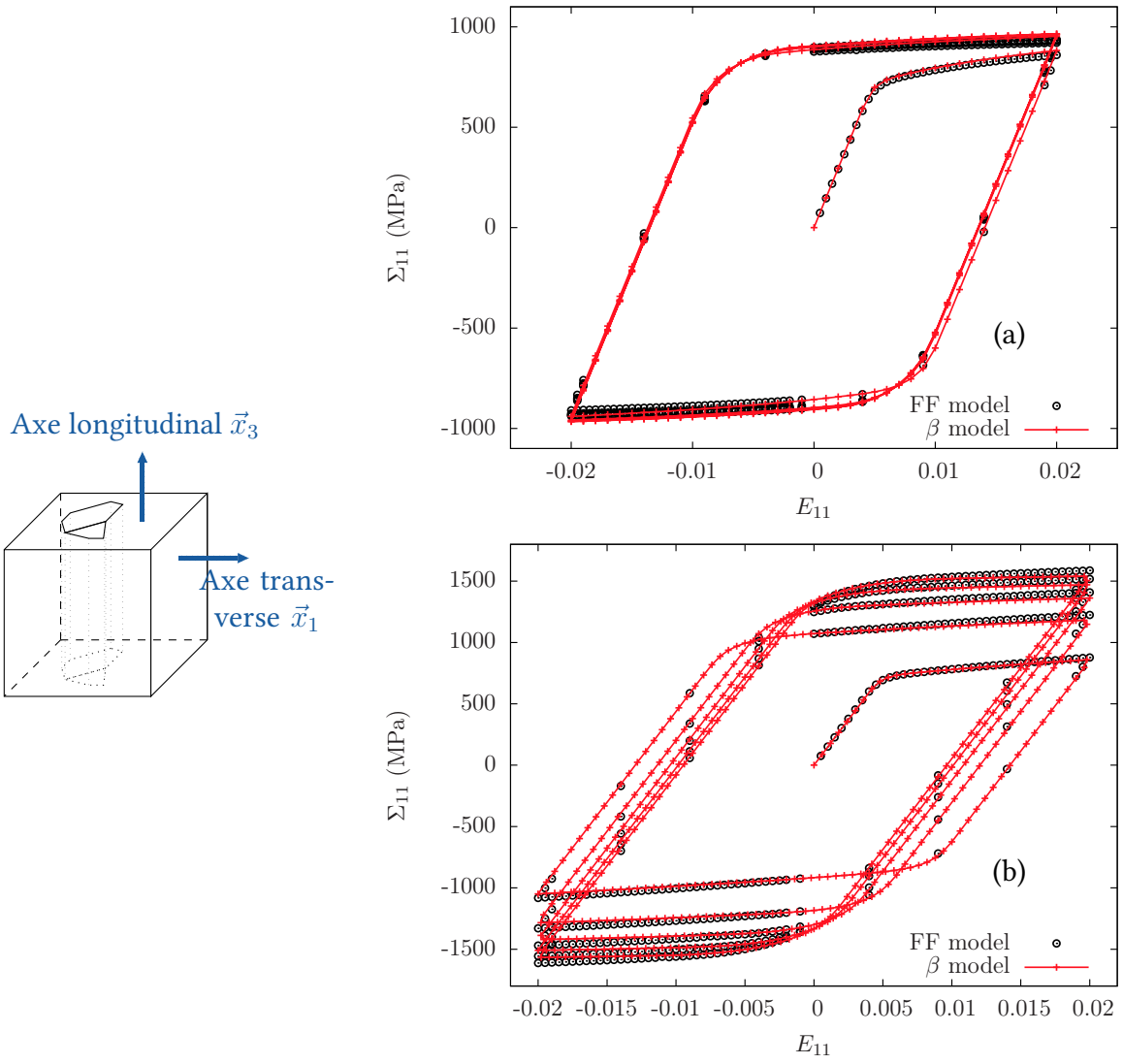


Figure 3.18 – *Réponse globale pour un chargement cyclique proportionnel avec un ratio en déformation de* 1 *pour le modèle en* β *et en champ complet. (a) : faible durcissement cyclique et (b) : fort durcissement cyclique.*

locales pour la composante principale de deux phases cristallographiques, $\phi_1 = 0°$ et $\phi_1 = 45°$, sont représentées sur la figure 3.19 pour le jeu de paramètres matériau conduisant à un fort durcissement cyclique (Fig. 3.19).

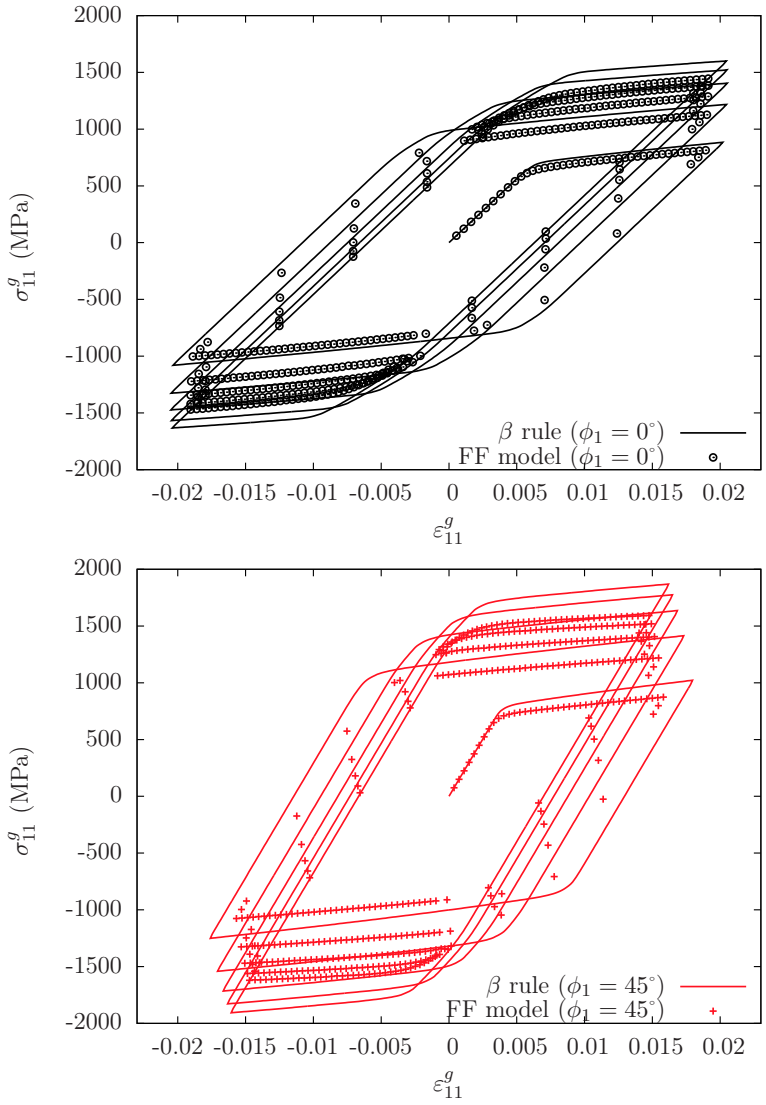


Figure 3.19 – *Réponses locales moyennées pour 12 simulations CPFE ou la règle en β lors d'un chargement cyclique uniaxial avec les paramètres d'écrouissage modifiés (deux orientations $\phi_1 \in \{0°, 45°\}$ sont considérées).*

Pour ces deux réponses locales, on remarque une surestimation progressive au cours des cycles de la contrainte locale. En particulier pour la phase cristallographique avec $\phi_1 = 45°$, on remarque que la règle en β surestime le module d'écrouissage et la déformation de cette phase, ce qui conduit à une contrainte locale plus élevée que celle de la référence en champ complet. L'écart en contrainte entre les estimations locales des modèles en champ moyen et celles de la référence par éléments finis s'amplifie au cours des cycles. De manière générale pour des chargements cycliques avec des paramètres matériau générant un fort durcissement cyclique, une attention particulière devra être portée sur les estimations locales du modèle. Sur la figure 3.20, les contraintes finales en traction pour les quatre premiers cycles sont tracées en fonction de la déformation plastique par phase cristallographique pour $\phi_1 \in \{0°, 6°, 12°, ..., 45°\}$.

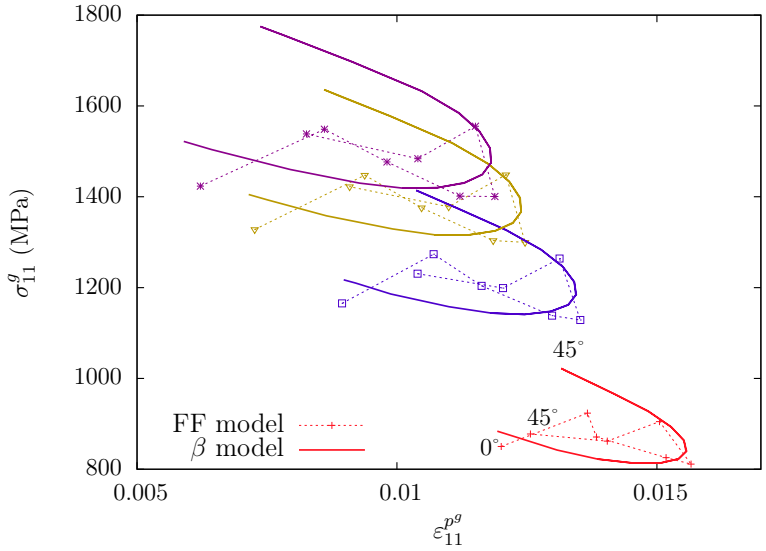


Figure 3.20 – *Valeurs finales en traction pour les quatre premiers cycles de la contrainte et de la déformation plastique par phase cristallographique pour douze simulations CPFE ou la règle en β (nous représentons dans ce cas l'enveloppe de tous les points) avec les paramètres d'écrouissage modifiés.*

On peut aisément relever l'augmentation progressive de l'erreur commise dans les estimations locales de la contrainte du modèle en β au cours des cycles. A déformation totale imposée, il est normal de voir la déformation plastique diminuer lors du durcissement puisque la contrainte augmente (donc la déformation élastique). Il faut noter que l'hétérogénéité entre les phases s'amplifie à chaque cycle, l'intervalle des valeurs de la déformation plastique passant de $[0{,}012\,;\,0{,}016]$ à $[0{,}006\,;\,0{,}014]$. Malgré cela, la réponse locale reste en bon accord avec la référence CPFE (Fig. 3.18).

Traction transverse uniaxiale avec un ratio cyclique en contrainte $R_\sigma = -0.5$

Les chargements non symétriques permettent de confronter le modèle à un phénomène mécanique bien connu appelé rochet. Il a été largement étudié sur différents alliages métalliques. Une revue de ce phénomène peut être trouvée dans [Chaboche, 2008]. La règle en β a déjà été testée sur ce type de phénomène dans [Abdeljaoued et al., 2009] où un nouveau paramètre δ est introduit pour contrôler l'augmentation de la déformation plastique d'un cycle à l'autre au bout d'un certain nombre de cycles :

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}}^g = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\mathrm{gvp}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{D}} : (\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^g - \delta \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vpg}) \sum_s |\dot{\gamma}^s| \tag{3.31}$$

En réalité, l'ajout de ce paramètre revient à considérer l'écrouissage de voisinage comme la somme d'un écrouissage non linéaire et d'un écrouissage linéaire, ce dernier permettant de stopper le rochet. D'autre part, **Saï** et **Cailletaud** ont étudié les formes d'écrouissage et les combinaisons locales/globales entraînant le phénomène de rochet [Sai and Cailletaud, 2006, Cailletaud and Sai, 2008]. Leur conclusion est que celui-ci apparaît uniquement lorsque la variable en β^g et l'écrouissage cinématique x^s ont une évolution non linéaire. La figure 3.21 illustre les réponses mécaniques globales obtenues pour les deux types de modélisation (champ complet et champ moyen) pour deux valeurs du paramètre de non linéarité de l'écrouissage

cinématique local.

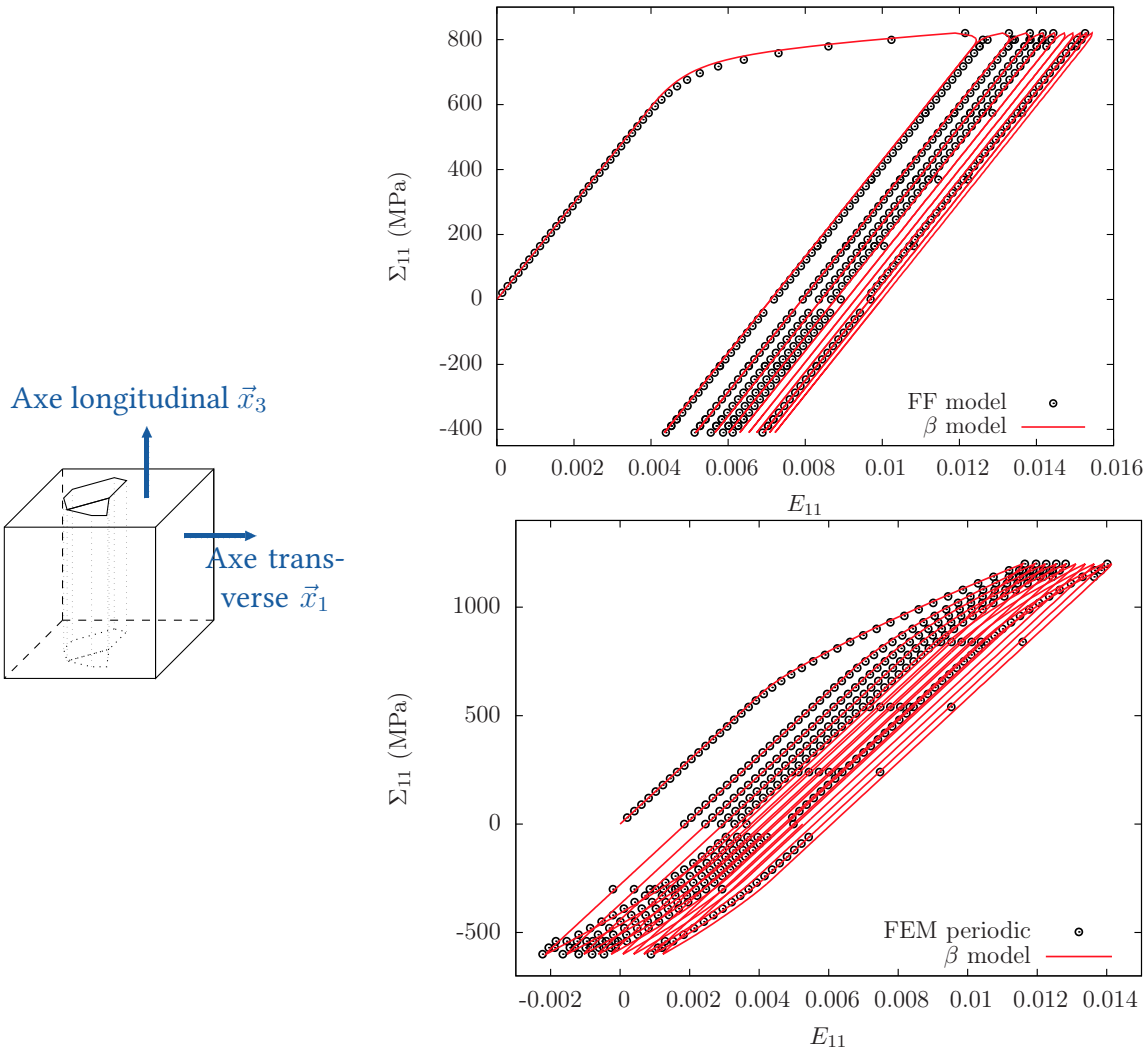


Figure 3.21 – *Réponses globales pour le cas champ complet et champ moyen lors d'un chargement cyclique uniaxial de traction-compression piloté en charge et un ratio $R_\sigma = -0.5$ (limite d'élasticité à environ 700 MPa. haut : forte valeur de $d = 5000$ et bas : faible valeur de $d = 100$.*

Avec les paramètres initiaux ($d = 5\ 000$), on remarque une accumulation de déformation inélastique au cours des cycles qui tend à se saturer après dix cycles. A la décharge, la réponse reste élastique. Le phénomène de rochet ne peut pas être observé dans ce cas puisque la variable x^s d'écrouissage n'évolue pas à la décharge. Lors de la première traction, un écoulement plastique prononcé est observé. La contribution de la viscosité, qui peut s'écrire par des relations d'équivalence $\Sigma_v = K_{eq}(\dot{E}^p)^{1/n}$, va donc être essentielle : on est en présence d'un régime de fluage cyclique. Sur cette même traction, le matériau va s'écrouir. Avec les paramètres matériau utilisés, c'est essentiellement le jeu de variables d'écrouissage cinématique x^s qui va augmenter. Pour la seconde boucle de traction, la fonction seuil contient alors des valeurs pour les x^s non nulles (la surface de charge s'est déplacée proche de la valeur imposée Σ_{max}). Ainsi, la déformation plastique va être largement plus faible, mais toujours non nulle. S'il n'y avait pas de viscosité, la surface de charge se serait déplacée de la valeur imposée Σ_{11} au premier cycle ; les prochains cycles, à même contrainte imposée, auraient été purement

élastiques. Finalement, l'accumulation de déformation plastique visible sur la courbe 3.21 est directement liée au temps qu'il faut pour que la variable d'écrouissage déplace la surface de charge jusqu'à la valeur maximale imposée, et ainsi annule la contribution de la viscosité (plus de déformation plastique). Naturellement, le modèle en β et la référence par éléments finis vont prédire une saturation de la déformation inélastique.

Pour observer le phénomène de rochet, il faut générer un écrouissage cinématique tel que la surface de charge se soit translatée suffisamment pour obtenir un écoulement plastique avant d'atteindre la valeur minimale de la contrainte imposée. Dans notre cas, il s'agit d'une contrainte de compression égale à la moitié de la contrainte en traction (le rapport vaut bien $-0{,}5$). Le chargement est amplifié avec une valeur de contrainte maximale égale à $1200\,\mathrm{MPa}$ (contre $820\,\mathrm{MPa}$ dans le cas précédent) et la valeur du paramètre d est diminuée à 100 (Fig. 3.21). Nous remarquons alors que les boucles de chargement s'ouvrent en compression, ce qui signifie qu'une déformation plastique négative apparaît. Sur le faible nombre de cycles réalisés, l'incrément de déformation plastique semble constant. Nous n'avons donc pas introduit le paramètre δ. Nous avons observé également un très bon accord sur les réponses par phase cristallographique sur ce type de chargement.

Chargement en traction puis torsion : étude du rochet biaxial

Nous avons discuté dans le paragraphe précédent du phénomène de rochet pouvant se développer en traction lors de chargement cyclique non symétrique. Une autre façon d'observer ce phénomène consiste à appliquer une pré-charge axiale sur un tube. Ensuite, une déformation cyclique en torsion autour de l'axe du tube est appliquée avec un signal proportionnel de rapport -1 tout en maintenant la charge axiale. A chaque cycle, une déformation plastique dans la direction axiale se développe. Pour notre étude, nous avons imposé une contrainte dans la direction $\vec{x}_1$ (axe transverse) de $1200\,\mathrm{MPa}$ dans un premier temps. Les autres composantes du tenseur des contraintes sont maintenues égales à zéro. Ensuite, une déformation en cisaillement pur est appliquée $E_{12} = \pm\, 0{,}02$ avec une vitesse de $\dot{E}_{12} = \pm\, 10^{-5}\,\mathrm{s}^{-1}$ tout en maintenant la contrainte transverse (signal triangulaire). Nous ne présentons que les résultats pour une valeur de d égale à 100 (Fig. 3.22).

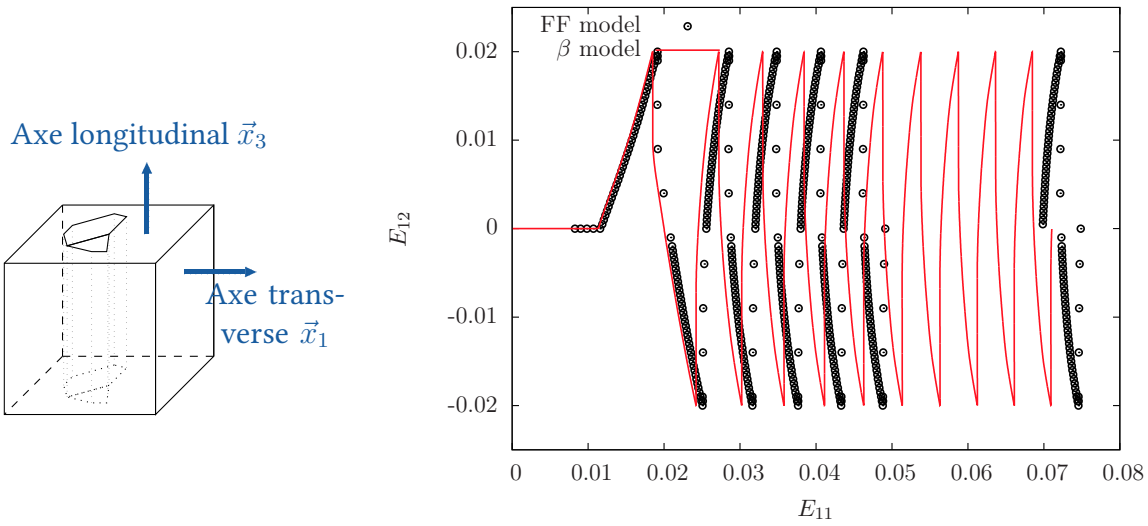


Figure 3.22 – *Réponse globale pour douze simulations CPFE et la règle en β sur un chargement biaxial : précontrainte $\Sigma_1 1$ puis une sollicitation cyclique en cisaillement $R_\varepsilon = -1$.*

On remarque un écart progressif entre la réponse macroscopique du modèle en β et les calculs sur un VER. Le modèle d'homogénéisation sous-estime la déformation inélastique se développant dans la direction axiale. Cela est à mettre en parallèle des calculs monotones en cisaillement pur, où la réponse du modèle en β était trop rigide par rapport aux calculs de référence.

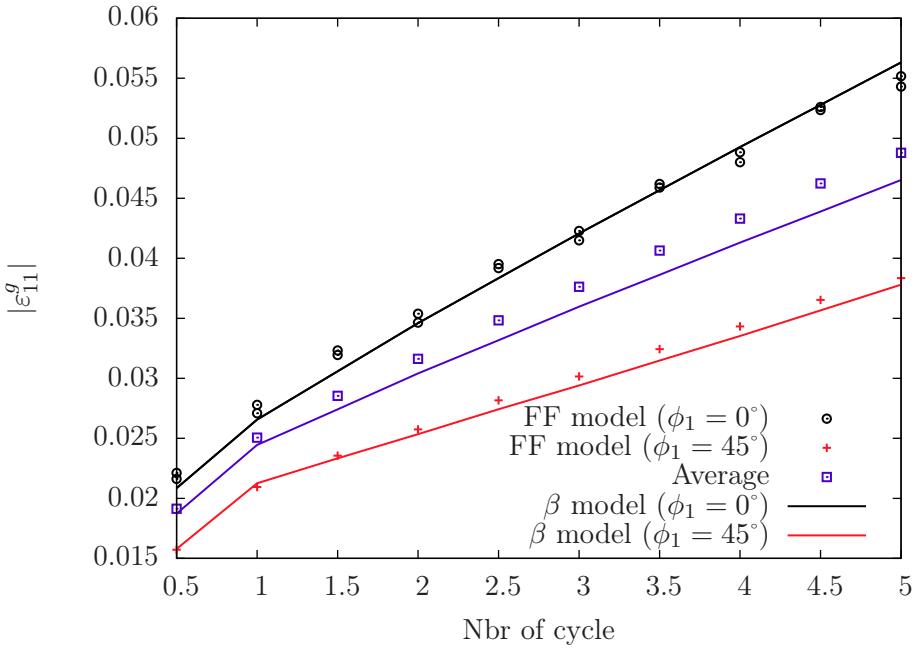


Figure 3.23 – *Evolution de l'incrément macroscopique et pour deux « phases cristallographiques » ($\phi_1 \in \{0°, 45°\}$) de déformation plastique axial en fonction du nombre de cycles.*

3.3 De l'agrégat numérique au matériau réel

Nous appliquons maintenant les modèles qui ont été proposés et leurs outils numériques associés à la modélisation de l'alliage DS200+Hf. Un premier paragraphe est consacrée à la confrontation de la réponse macroscopique du modèle aux essais réalisés par **Mataveli Suave** [Mataveli Suave, 2017] dans la direction transverse, aux températures de 650 °C et de 900 °C. Le jeu de variables internes β^g aura préalablement été calibré sur des calculs CPFE, qui ne seront pas présentés car ils n'apportent aucune information supplémentaire par rapport à la partie précédente. Dans un deuxième temps, les hypothèses de modélisation utilisées seront discutées. En effet, le matériau DS200+Hf réel est éloigné de l'agrégat numérique, qui est constitué de grains colonnaires parfaitement orientés selon l'axe de solidification. Dans la réalité, on peut observer des désorientations importantes entre 5° et 10°, par exemple. De plus, dans la zone des « gros grains », la microstructure est loin d'être comparable au pavage de **Voronoï** classiquement utilisé. En particulier, une « tortuosité » des joints apparaît. Nous tentons donc d'apporter un début de réponse, en discutant successivement la question de la tortuosité et celle de la désorientation.

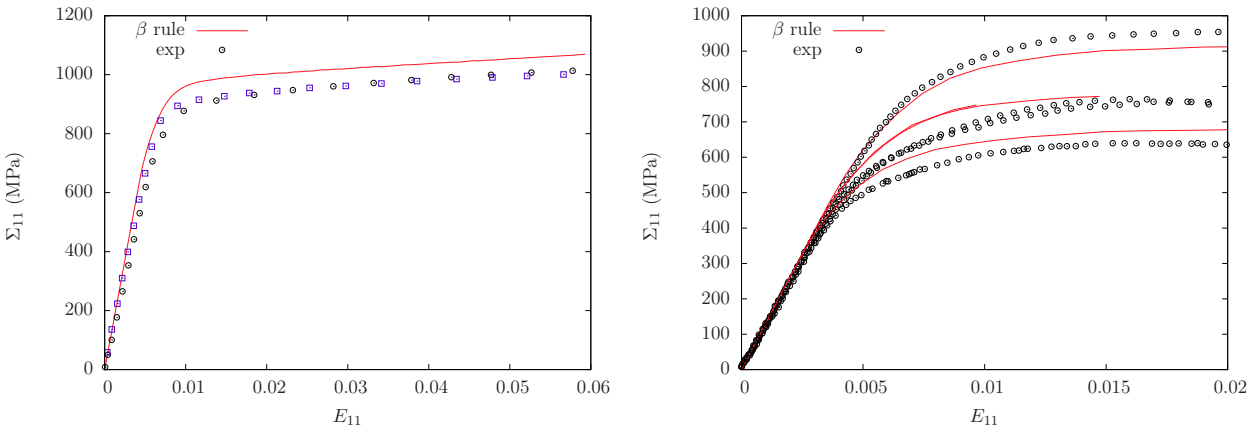
3.3.1 Modélisation mécanique du DS200 sous une sollicitation transverse

Dans cette partie, les différents essais de **Mataveli Suave** [Mataveli Suave, 2017] sont comparés aux estimations fournies par le modèle en β. L'identification des composantes du tenseur d'accommodation $\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}^g$ a été réalisée précédemment en utilisant des calculs CPFE sous un chargement uniaxial de traction transverse ou de cisaillement transverse. Le tableau 3.4 donne les valeurs obtenues pour les composantes de ce tenseur pour les deux températures considérées dans la thèse.

650 °C			900 °C		
D_{11}	D_{12}	D_{44}	D_{11}	D_{12}	D_{44}
200	120	80	120	90	70

Table 3.4 – *Valeurs des composantes du tenseur d'accommodation $\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}$ aux deux températures cibles de la thèse.*

Dans [Cailletaud et al., 2015], les auteurs montrent le risque qui est lié à l'utilisation d'un jeu de paramètres d'écrouissage dans lequel le paramètre réglant la non-linéarité de l'écrouissage cinématique varie beaucoup en fonction de la température. Nous proposons donc de ne pas faire évoluer ce paramètre avec la température à l'échelle locale (voir le chapitre 1). Le même risque est présent sur le paramètre d'accommodation entre grains $\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}$, puisque la loi d'évolution de la variable $\boldsymbol{\beta}^g$ est construite sur le même formalisme [Cailletaud, 1987]. Dans la suite, nous tenterons de conserver le même ordre de grandeur à chaque température pour les trois composantes du tenseur $\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}$ à évaluer. La figure 3.24 montre la confrontation entre les résultats du modèle micromécanique et des essais expérimentaux sur le DS200 aux deux températures réalisés par **Mataveli Suave** [Mataveli Suave, 2017].



Température : 650 °C — Température : 900 °C

Figure 3.24 – *Confrontation de la règle en β avec des essais expérimentaux de* **Mataveli Suave** *sur le DS200 [Mataveli Suave, 2017]. A 900 °C, trois vitesses de chargement sont utilisées : $\dot{E}_{11} = 10^{-3}\ s^{-1}$, $\dot{E}_{11} = 10^{-4}\ s^{-1}$ et $\dot{E}_{11} = 10^{-5}\ s^{-1}$.*

Le modèle fournit de bonnes prévisions aux deux températures. On pourrait probablement améliorer les résultats en incluant les données expérimentales en traction transverse dans la

boucle d'identification des paramètres. Nous avons préféré conserver un recalage des paramètres matériau à chaque échelle pour ne pas introduire des erreurs dues à la montée d'échelle dans l'optimisation de ces coefficients. Toutefois, la solution alternative serait également justifiée puisque les propriétés physiques d'un grain seul ne sont, en toute rigueur, pas comparables à celles du même grain dans un polycristal. Par exemple, certaines phases telles les carbures vont se former préférentiellement au niveau des joints de grains (les carbures d'Hafnium vont le renforcer) dans l'agrégat DS200+Hf alors qu'ils vont être positionnés quasi-aléatoirement dans les espaces inter-dendritiques [Mataveli Suave, 2017] pour un monograin MarM200+Hf. La figure 3.25 illustre les capacités du modèle pour du fluage à 900 °C dans la direction transverse et différentes charges appliquées [Mataveli Suave, 2017].

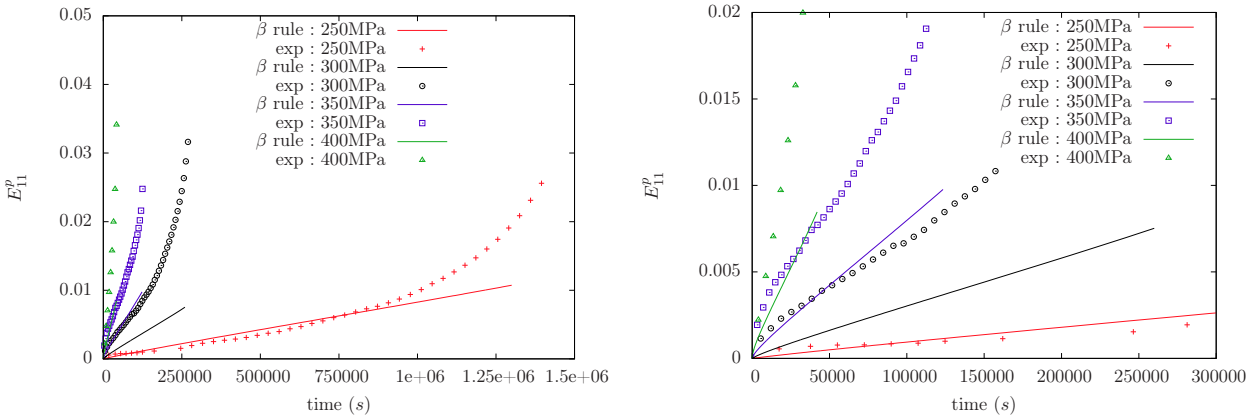


Figure 3.25 – *Comparaison des prévisions du modèle en β avec des résultats d'essais de fluage uniaxial à 900 °C dans la direction transverse sur DS200+Hf (***Mataveli Suave** *[Mataveli Suave, 2017]).*

On remarque un décalage pour les fortes charges, induit par un fluage primaire qui devient non négligeable et qui n'est pas bien représenté par le modèle, ou du moins pas suffisamment. Pour ce qui concerne la vitesse de fluage secondaire, le modèle fournit de bonnes corrélations, surtout pour une charge de 250 MPa, où il est facilement identifiable. En effet, aux fortes charges, le fluage secondaire est très court voire inexistant, au profit de la phase tertiaire, produite par l'endommagement du matériau. Dès 350 MPa, il est difficile d'identifier une partie linéaire dans l'évolution de la déformation plastique au cours du temps. D'autre part, le modèle n'a pas les ingrédients nécessaires pour modéliser le stade tertiaire où le matériau s'endommage. Or pour les fortes charges appliquées, il semble que se soit le régime de fluage prédominant.

3.3.2 Impact de la tortuosité des joints de grains sur le champ mécanique

Jusqu'à présent, la discussion a concerné les performances respectives des modélisations en champ moyen et en champ complet. La référence était constituée par le calcul CPFE utilisant une représentation explicite de l'agrégat. Malheureusement, le pavage de Voronoï construit les grains comme des domaines convexes, les joints de grains étant des droites en 2D ou des faces planes en 3D. Cette hypothèse ne représente pas la réalité dans la zone « gros grains ». Nous avons vu dans la partie 2.1 que la morphologie générale des grains n'avait que peu d'influence

sur la réponse macroscopique ou « par phase cristallographique ». Il semble important de vérifier maintenant quel est l'impact de la tortuosité à une échelle plus locale, sur la fluctuation du champ mécanique. La figure 3.26 montre une cartographie EBSD de cette zone pour le DS200, réalisée par **Mataveli Suave et al** [Mataveli Suave et al., 2016].

Figure 3.26 – *Cartographie EBSD d'une coupe perpendiculaire à la direction de solidification d'une échantillon DS200 prélevée dans une zone « gros grains » (issue de [Mataveli Suave et al., 2016]).*

Maillage et mise en données

Le maillage d'une image EBSD surfacique est devenu monnaie courante dans l'étude du comportement mécanique des polycristaux, la difficulté principale étant de discrétiser le contour des phases le plus fidèlement possible. Définir le contour revient à trouver les pixels ayant plusieurs phases dans leur entourage et dire que le contour se situe entre eux. Cette caractérisation « brute » n'est pas suffisante car elle génère des joints en escalier, qui conservent la trace des pixels. De plus, le nombre d'éléments à utiliser serait colossal s'il s'agissait de générer un maillage qui suive le contour des pixels. Une opération de lissage est donc nécessaire.

La première idée consiste à définir un segment de droite entre un nombre régulier de pixels associés à un même contour. On se risque alors à altérer la topologie générale du grain en lissant aveuglément ce contour, ce qui peut mettre en péril notre volonté d'exhiber un effet des « petites dentelures » du joint de grains sur le comportement mécanique. C'est pourquoi il est nécessaire de disposer d'outils spécifiques pour définir rigoureusement la géométrie du contour. C'est dans ce but que nous utilisons l'approche proposée par **N'Guyen** [N'Guyen, 2014], qui introduit les outils de la morphologie mathématique [Matheron, 1989], et en particulier l'ergodicité (plus de détails sur la méthode dans [N'Guyen, 2014]). Concrètement, l'étape clé consiste en la recherche des points principaux de la topologie d'une phase, qui caractérisent concavité et convexité du contour. Pour ce faire, une étape de « squelettisation » de chaque grain puis du complémentaire (le reste de la surface) est effectuée. L'étape de « lissage » débute alors à partir de chacun des points principaux. On définit finalement un intervalle maximal autorisé en pixels entre chaque point. La figure 3.27 montre trois types de lissage introduits pour cette étude, avec des finesses différentes de 9 à 72 pixels.

La méthode permet d'aboutir à un « lissage » plus ou moins important du joint de grains sans altérer sa forme générale. Enfin, une triangularisation de **Delaunay** est réalisée pour obtenir un maillage surfacique. Celui-ci est optimisé en utilisant les outils développés par l'INRIA et

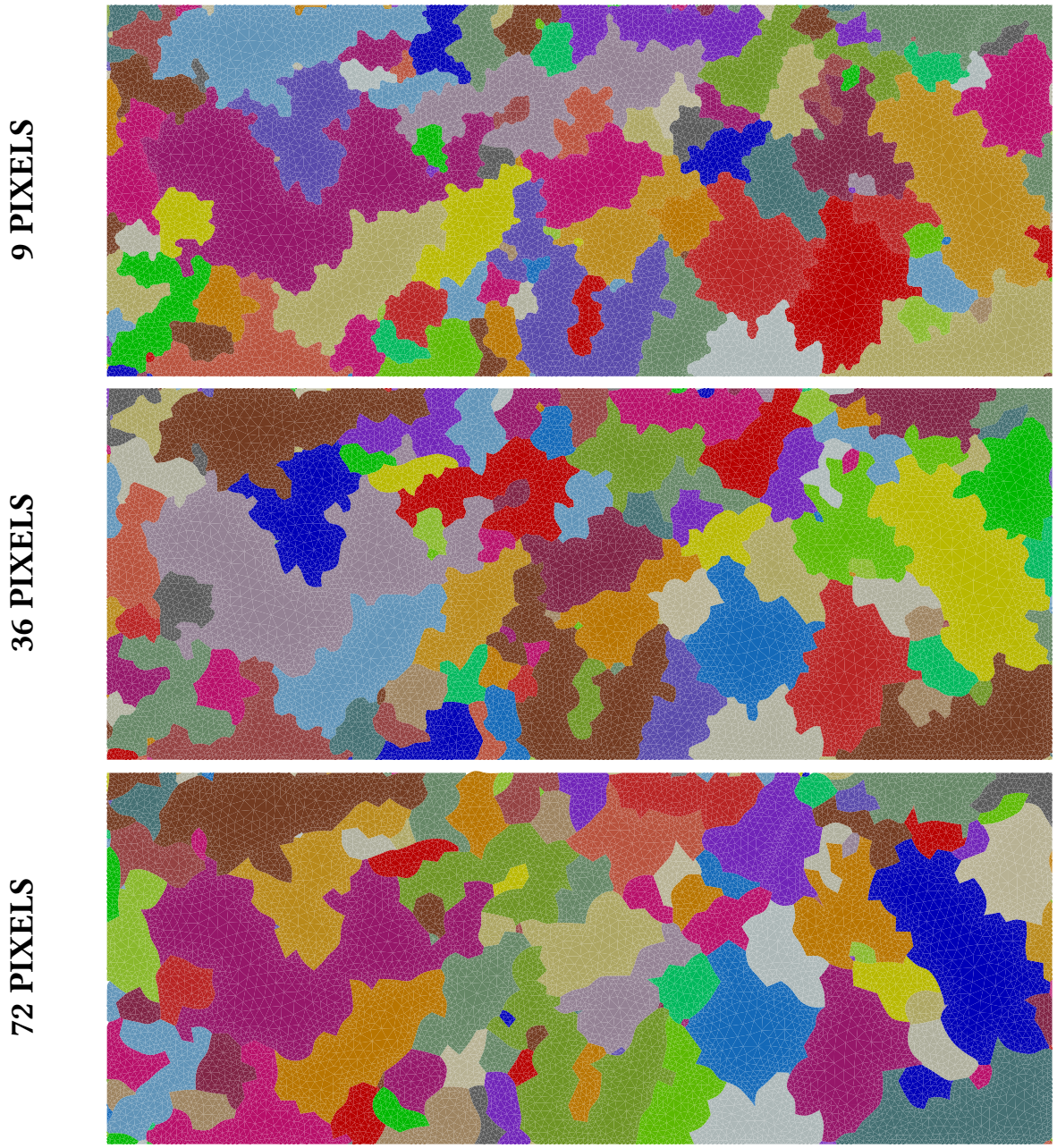


Figure 3.27 – *Différentes caractérisations des joints de grains de l'image EBSD de départ obtenues à l'aide des outils de morphologie mathématique développés par* **N'Guyen** *[N'Guyen, 2014].*

interfacés avec le code Zset (module *yams*). La figure 3.28 montre le maillage pour les différentes segmentations, pour deux grains de l'image EBSD de départ.

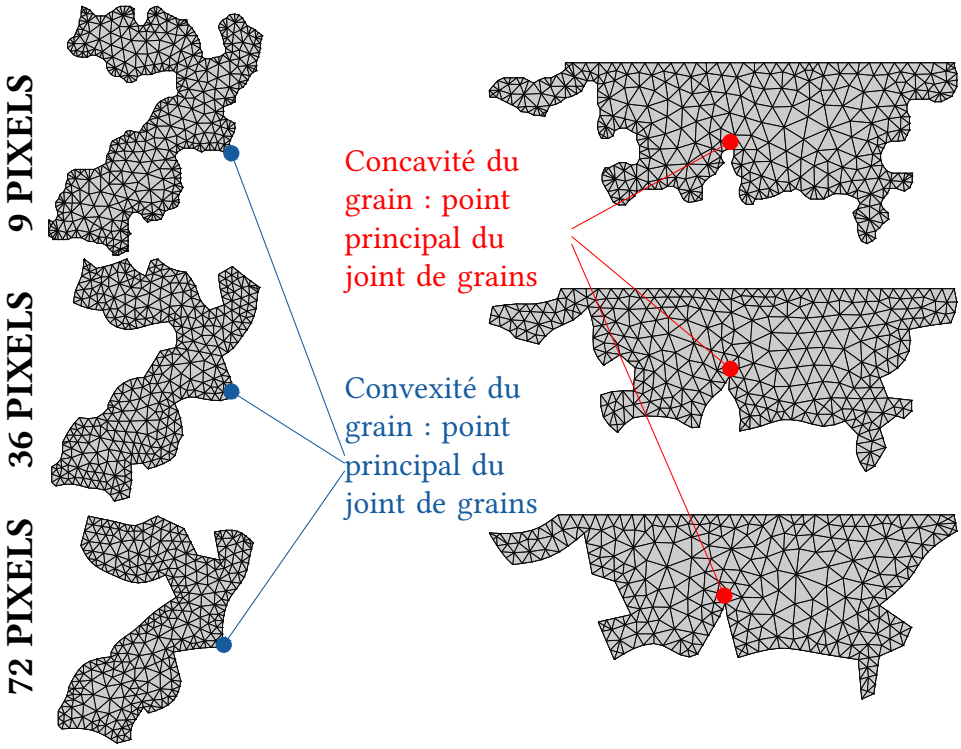


Figure 3.28 – *Différentes segmentations et maillages correspondants pour deux grains. Un point principal de la segmentation (concavité ou convexité) est repéré dans chaque grain.*

Pour assigner les orientations cristallographiques, propres à chaque grain et données par l'analyse EBSD, un script se base sur le centre de gravité de chaque grain. Une erreur admissible est introduite afin de prévenir certaines erreurs dues à la non-convexité de certains grains. En effet, pour ces grains, le centre de gravité peut se situer hors de sa surface et proche de celui d'un autre grain. Pour ceux qui ne remplissent pas le critère d'erreur, qui représentent moins de $10\,\%$ des grains du maillage, une assignation manuelle est effectuée.

Résultats de traction transverse

Le chargement étudié est une traction transverse en utilisant les paramètres matériau identifiés sur les essais à $900\,°C$, avec la même loi de comportement locale que pour le DS200+Hf. Nous présentons l'isocontour de la contrainte 3.29 et de la déformation équivalente 3.30 de **von Mises** pour les différentes segmentations.

Qualitativement, les différences sont négligeables et la tortuosité ne semble pas générer de localisation particulière sur les champs mécaniques. De plus, la figure 3.31 compare les réponses mécaniques moyennes par grains pour les segmentations « 9 pixels » et « 72 pixels » en fonction du volume du grain.

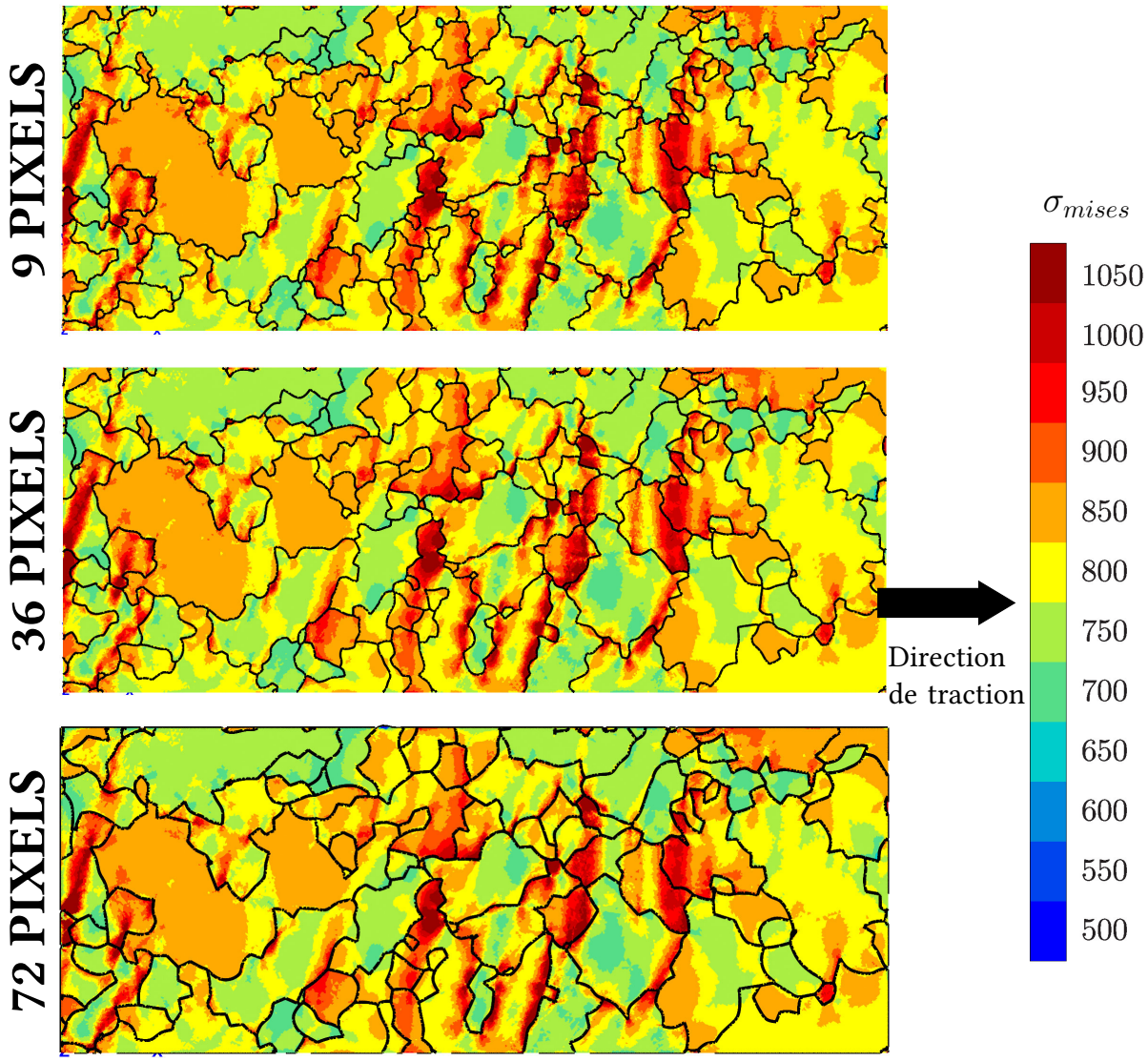


Figure 3.29 – *Evolution de la carte de la contrainte de* **von Mises** *pour un chargement de traction transverse monotone en fonction du pas de segmentation choisi.*

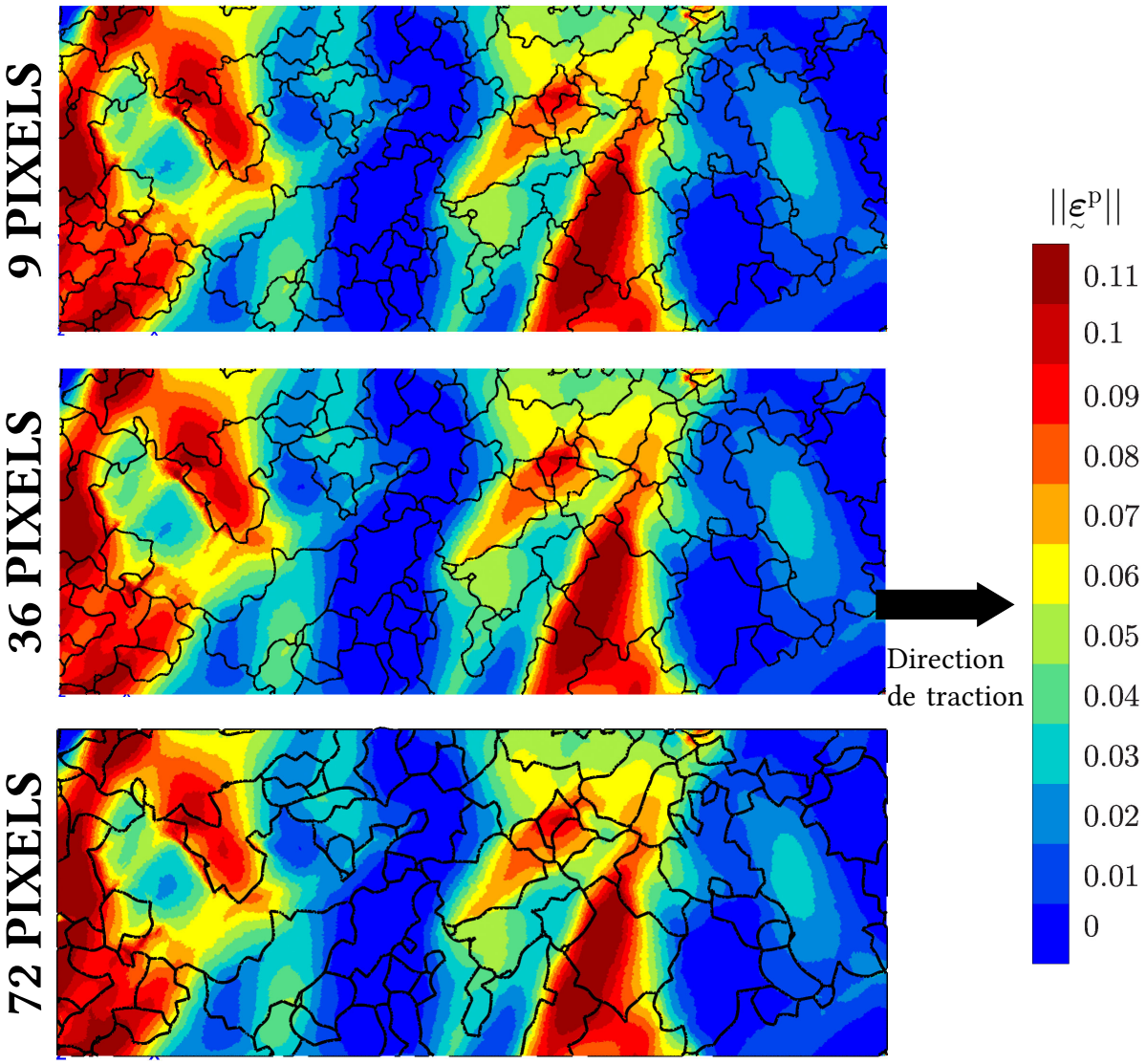


Figure 3.30 – *Evolution de la carte de la déformation équivalente de* **von Mises** *pour un chargement de traction transverse monotone en fonction du pas de segmentation choisi.*

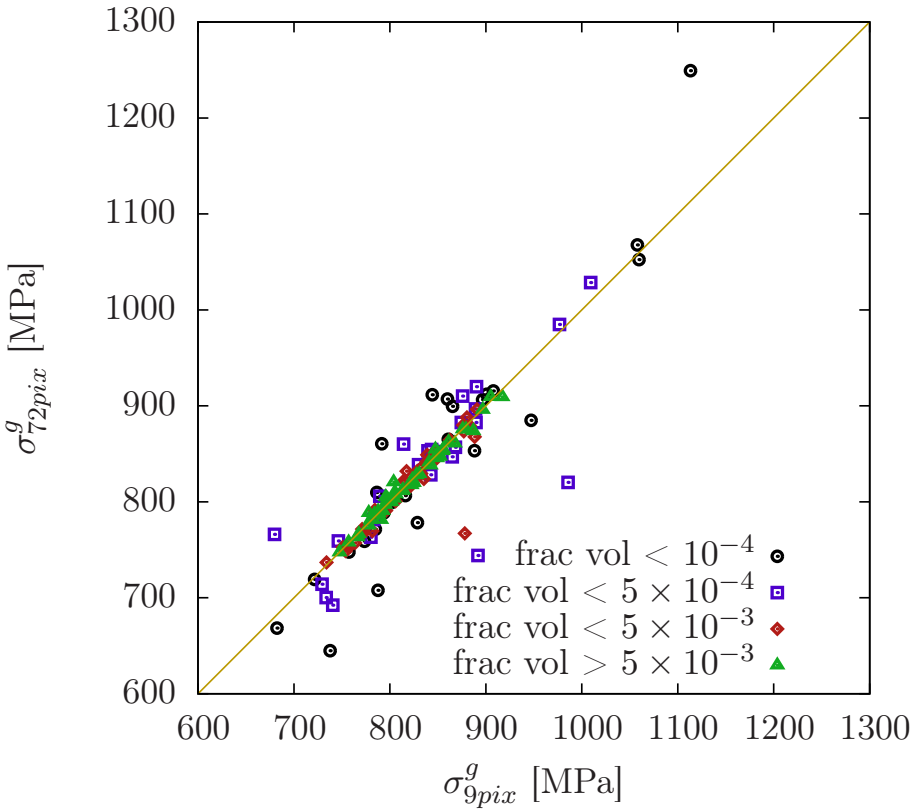


Figure 3.31 – *Comparaison de la contrainte équivalente de* **von Mises** *obtenue par grain pour le maillage appelé « 72 pixels » par rapport au maillage appelé « 9 pixels ». Les différents points représentent différents intervalles de la taille des grains.*

L'erreur qui est constatée sur certains grains est directement liée à la taille de ceux-ci qui est très faible. Pour ces petits grains, la différence de segmentation peut altérer la taille et la morphologie générale des grains, et par conséquent la réponse mécanique. Cela est donc à dissocier d'un réel effet de la tortuosité. Finalement, nous ne constatons pas d'effet significatif de la tortuosité sur la réponse de l'agrégat. Ainsi les améliorations sur la durée de vie observées expérimentalement par l'introduction d'une tortuosité du joint de grains ne semblent pas directement explicables par une simulation qui utilise la mécanique des milieux continus classique. Les résultats pourraient être différents si un comportement aux joints de grains avait été introduit (maillage de l'interface, comportement spécifique des joints, ...). D'autre part, les calculs sont réalisés sous l'hypothèse des petites perturbations et avec un seul modèle de type **Méric-Cailletaud**. Des localisations plus importantes du champ mécanique pourraient être constatées en utilisant les transformations finies et/ou des modèles introduisant des termes plus locaux. Dans notre cadre de travail et avec les hypothèses de modélisation faites, le choix a consisté à ne pas traiter la tortuosité.

Des conclusions plus contrastées sur une microstructure « bambou »

Précédemment, l'étude s'est portée sur un échantillon prélevé « Transverse/Transverse » : la direction de solidification est alors normale au plan d'observation. Cela justifie la possibilité d'extruder cette surface en faisant l'hypothèse que sur l'épaisseur faible de l'échantillon, les grains sont parfaitement colonnaires. On parle d'essais dans la direction transverse. Pourtant, il est aussi possible d'usiner une éprouvette de manière « Transverse/Longitudinale » qu'on sollicite dans la direction transverse : la direction longitudinale est alors la largeur au lieu de l'épaisseur. La particularité du prélèvement est de faire apparaître une microstructure de type « bambou » où tous les grains sont « en série ». La figure 3.32 montre un calcul de fluage transverse réalisé à partir de la microstructure obtenue par **Mataveli Suave** [Mataveli Suave, 2017].

On observe clairement une localisation de la déformation plastique au niveau des joints de grains. Celle-ci est bien plus marquée que dans le cas précédent, ce qui justifie d'autant mieux les ruptures intergranulaires observées expérimentalement ($e.g.$ dans [Mataveli Suave, 2017]).

3.3.3 Introduction d'une désorientation primaire : cristallographique et géométrique

Ce dernier paragraphe présente de premiers éléments de discussion sur la prise en compte d'une désorientation primaire des grains. Pour le moment, le modèle en β a été utilisé avec l'hypothèse d'une morphologie parfaitement colonnaire dans la direction de solidification et d'un axe cristallographique $\langle 001 \rangle$ confondu avec l'axe macroscopique $\vec{x}_3$. Malheureusement, la réalité est plus complexe. Deux types de défauts sont observés sur le DS200. Le premier est géométrique : les joints de grains ne sont pas parfaitement alignés avec la direction de croissance. Certains grains vont avoir une taille plus grande en fin de solidification et vont finalement adopter une forme conique. Ce type de défaut peut être introduit dans le modèle en modifiant le calcul du tenseur d'**Eshelby**. Nous ne prenons alors pas en compte l'augmentation du volume mais seulement l'aspect désorienté du joint de grains d'un angle Φ_{geom} par rapport à l'axe longitudinal du matériau. Par ailleurs, il existe une désorientation cristallographique Φ_{crist}, qui peut être observée par des mesures EBSD menées sur le DS200+Hf (e.g. dans [Mataveli Suave et al., 2016]) entre l'axe cristallographique <001> et l'axe des grains colon-

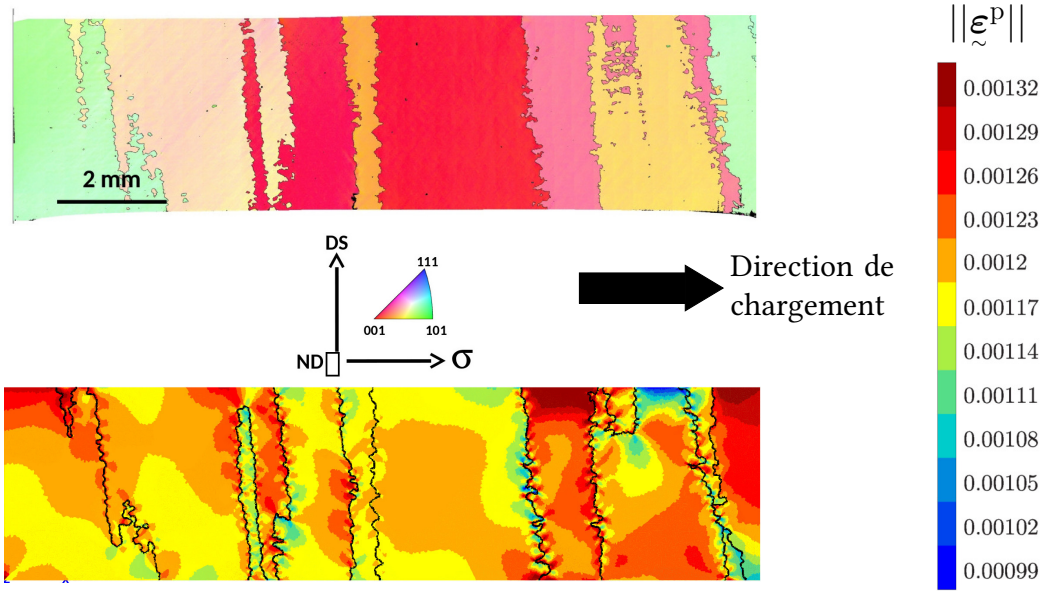


Figure 3.32 – *Isocontour de la déformation plastique cumulée pour un chargement de fluage à* 900 °C/400 MPa *dans la direction transverse en utilisant une analyse EBSD d'une microstructure « bambou » pour le DS200 réalisée par* **Mataveli Suave** *[Mataveli Suave, 2017].*

naires. Le schéma 3.33 illustre les deux types de défauts.

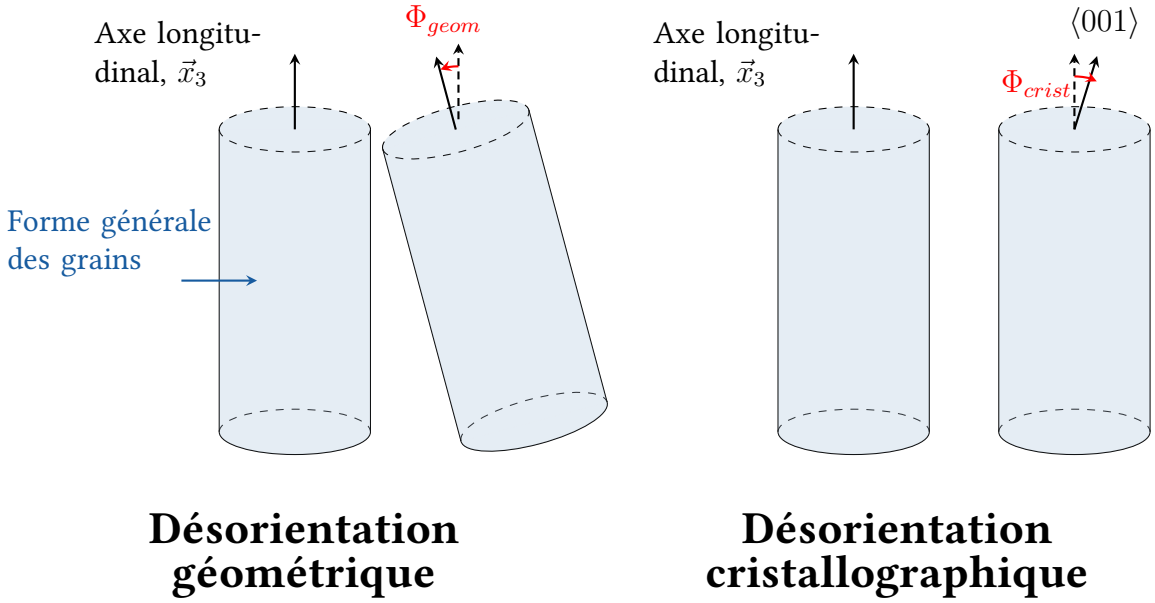


Figure 3.33 – *Représentation schématique des deux types de désorientation pouvant être observés sur le superalliage DS200.*

A notre connaissance, les deux phénomènes ne semblent pas couplés, ce qui veut dire qu'il faut définir pour chaque grain indépendamment deux jeux de rotations pour traduire les deux désorientations.

Prise en compte de la désorientation cristallographique : Commençons par le traitement de la désorientation cristallographique, qui peut s'introduire de manière simple dans la règle en β. Il suffit en réalité d'élargir le nombre de « phases cristallographiques » à considérer. Au lieu de décomposer régulièrement ϕ_1 en conservant Φ et ϕ_2 nuls, on définit premièrement la désorientation cristallographique par le biais de l'angle d'**Euler** Φ. Par exemple, on peut se baser sur les densités de probabilité obtenues par des mesures EBSD de **Mataveli Suave** sur une éprouvette DS200 avec un grand nombre de grains [Mataveli Suave, 2017]. Supposant que cette fonction de répartition soit décrite par une loi normale (voir la figure 3.34), la fonction *random.normal* du module *numpy* dans Python permet de générer un nombre N de grains avec une valeur Φ respectant globalement la fonction de répartition trouvée expérimentalement. Prenons un jeu de 150 angles Φ respectant la condition précédente, les deux autres angles étant ensuite choisis aléatoirement dans le domaine $(\phi_1, \phi_2) \in [0, 360[\times[0, 360[$. La figure 3.34 illustre la figure de pôle selon l'axe $\langle 001 \rangle$ des orientations cristallographiques générées.

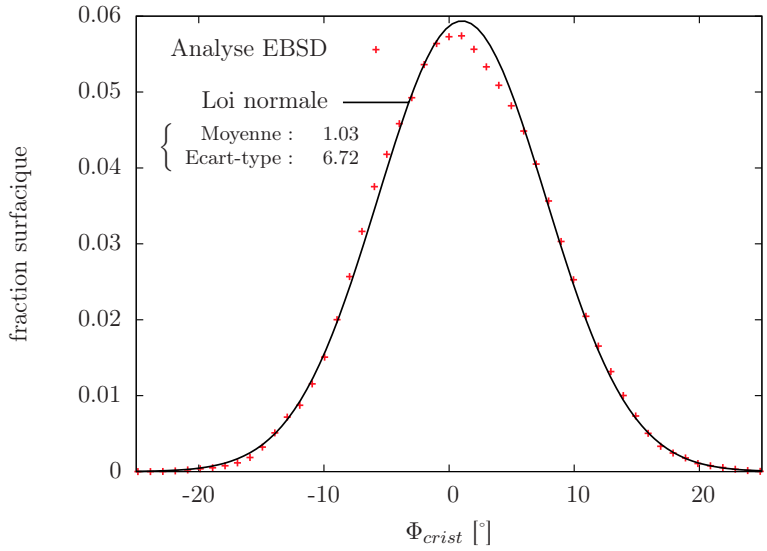
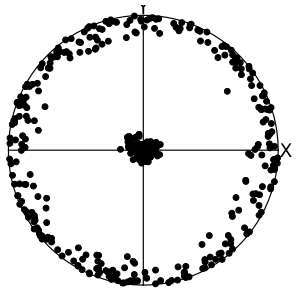


Figure de pôle selon l'axe $\langle 001 \rangle$

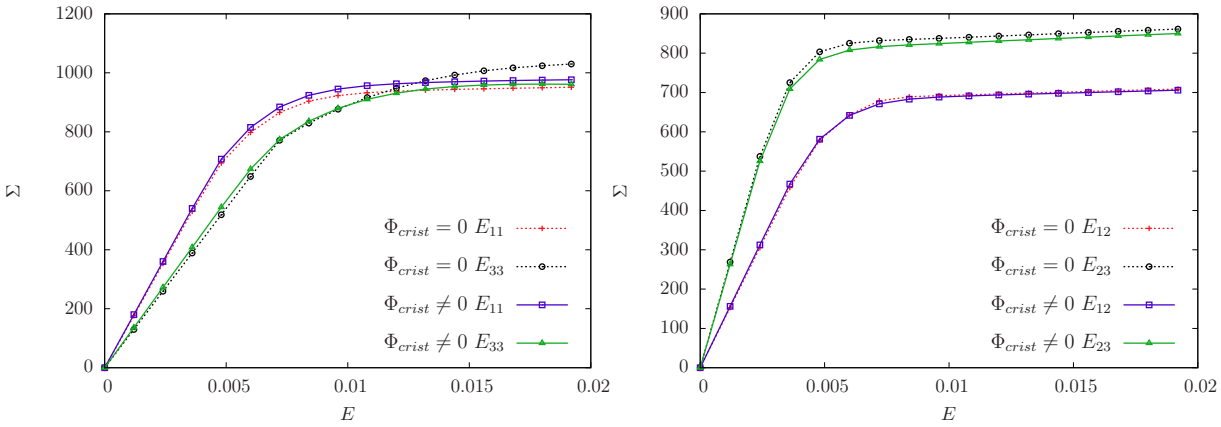


150 grains avec une désorientation primaire imposée par la distribution expérimentale

Figure 3.34 – *Comparaison des mesures EBSD réalisées dans [Mataveli Suave et al., 2016] avec une loi normale utilisée ensuite pour générer un jeu d'orientations cristallographiques incluant une désorientation primaire réaliste.*

Avec une telle procédure, les fractions volumiques doivent être égales ($\forall g, f^g = 1/N_{grains}$ dans notre cas). La densité de probabilité est ainsi traduite par « le générateur aléatoire » d'angles Φ. Une autre façon de procéder consiste à prendre des valeurs de désorientation cristallographique régulières dans un intervalle à définir (par exemple tous les $2\,^\circ$ dans l'intervalle $[-20\,^\circ, 20\,^\circ]$). Pour chaque angle Φ, on définit un nombre N d'orientations secondaires (ϕ_1, ϕ_2) et une fraction volumique égale à la probabilité que donne la loi normale pour la désorientation considérée.

La figure 3.35 met en parallèle les résultats monotones et uniaxiaux obtenus en traction simple et cisaillement pur en considérant le DS « parfait » et ceux obtenus en tenant compte d'une désorientation cristallographique primaire des grains. De manière générale, les écarts ne sont pas très importants. Il y a quand même une différence significative sur les modules d'écrouissage en sens long. Il est donc important d'inclure des essais expérimentaux sur des monograins



Traction Cisaillement

Figure 3.35 – *Modifications apportées aux réponses uniaxiales de traction et cisaillement dans les directions longitudinale et transverse en incluant la désorientation cristallographique générée précédemment. La vitesse de chargement est* $\dot{E} = 10^{-4}\mathrm{s}^{-1}$ *pour les paramètres matériau du DS200 à* $650\,^{\circ}\mathrm{C}$.

MarM200+Hf soigneusement orientés dans le processus d'identification du comportement mécanique à l'échelle locale. C'est la condition nécessaire pour ne pas rajouter un biais dans l'évaluation des paramètres en considérant un module d'écrouissage trop élevé en raison d'un défaut d'orientation.

Prise en compte de la désorientation géométrique : Ce défaut morphologique fait directement référence au tenseur d'**Eshelby**. Sans tenir compte de cette désorientation géométrique, le calcul de ce tenseur est effectué en réalisant le calcul de l'intégrale présentée en 2.34 sur un cylindre dont l'axe est confondu avec une direction macroscopique de chargement ($\vec{x}_3$ dans ce manuscrit) qui représente la direction de solidification de l'alliage. Pour prendre en compte rigoureusement une désorientation géométrique d'un angle Φ_{geom} par rapport à $\vec{x}_3$, il est nécessaire de modifier le calcul intégral précédent. Une idée simple consiste à calculer l'intégrale dans le repère de l'inclusion puis ensuite de ramener le tenseur d'**Eshelby** dans le repère macroscopique. Soit $[C]$ la matrice représentant le tenseur d'élasticité effectif dans le repère macroscopique. Nous définissons la matrice $[C^{geom}]$ représentant ce même tenseur dans le repère de l'inclusion désorientée en utilisant la matrice de passage $[P]$:

$$\left\{ \begin{array}{rcl} R_{ijkl} & = & P_{ik}P_{jl} \\ C^{geom}_{ijkl} & = & R^{-1}_{ijpq}C_{pqmn}R_{mnkl} \end{array} \right. \tag{3.32}$$

La matrice de passage P est définie à partir des trois angle d'**Euler** caractérisant l'orientation géométrique de l'inclusion dans le repère macroscopique. Ces trois angles d'**Euler** peuvent être pris égaux à ceux utilisés pour caractériser l'orientation cristallographique du grain, mais rien ne montre qu'ils le sont. Le calcul du tenseur d'**Eshelby** pour la phase g ayant une morphologie

cylindrique désaxée par rapport à la direction de solidification se fait avec la relation :

$$\begin{aligned} S'^{g}_{ijmn} &= \frac{1}{8\pi} C^{geom}_{pqmn} \int_{-1}^{1} \int_{0}^{2\pi} \frac{\xi_j \xi_q N_{ip} + \xi_i \xi_q N_{jp}}{D} d\theta d\zeta_3 \\ K_{ik} &= C^{geom}_{ijkl} \xi_j \xi_l \\ D &= \epsilon_{mnl} K_{m1} K_{n2} K_{l3} \\ N_{ij} &= \frac{\epsilon_{ikl} \epsilon_{jmn}}{2} K_{km} K_{ln} \end{aligned} \tag{3.33}$$

Le tenseur d'**Eshelby** obtenu est exprimé dans le repère de la phase g. Le tenseur d'**Eshelby** $\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^g$ du grain g s'exprime dans le repère macroscopique par le biais de la matrice $[S^g]$ selon :

$$S^g_{ijkl} = R_{ijpq} S'^{g}_{pqmn} R^{-1}_{mnkl} \tag{3.34}$$

Pour finir, la relation implicite pour obtenir le tenseur d'élasticité du MHE avec le schéma autocohérent (Eq. 2.35) nécessite à chaque itération de calculer à nouveau les tenseurs d'**Eshelby** de chaque grain. Cette étape est donc largement plus longue.

Dans la suite du manuscrit, les désorientations cristallographiques primaires et géométriques ne seront pas prises en compte. Pour la désorientation cristallographique, la démarche impose d'utiliser un jeu d'orientations suffisamment grand pour que la réponse soit représentative. Le modèle micromécanique passe d'un calcul sur 30 phases cristallographiques dans le cas DS « parfait » à 150 avec une désorientation primaire cristallographique (et il faut encore plus de phases différentes si nous ajoutons la désorientation géométrique). Néanmoins, tous les outils sont à disposition pour pouvoir ajouter ce paramètre pour étudier l'effet sur une structure ($e.g.$ aubes de turbines). Pour la désorientation géométrique, le premier frein dans son utilisation vient du manque de données expérimentales. Comme les grains ne sont pas seulement désorientés par rapport à l'axe de solidification mais ils adoptent une forme « en éventail », il est difficile de quantifier cette donnée. Durant cette étude, nous avons supposé que ce défaut avait un impact plus faible sur la réponse mécanique de l'agrégat vis-à-vis de la désorientation cristallographique.

CHAPITRE 4

Essais biaxiaux et simulations numériques pour le DS200

Sommaire

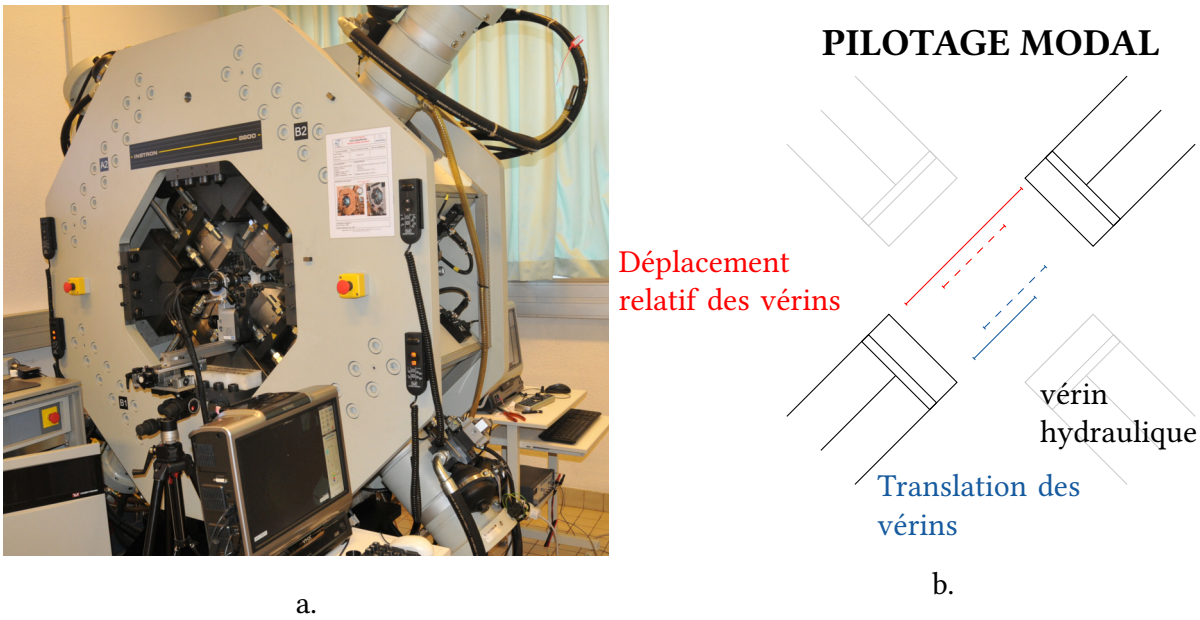
4.1 Matériel et méthode 127
4.2 Résultats expérimentaux 138

Les précédents chapitres ont permis d'établir une relation contrainte/déformation à l'échelle macroscopique par une approche micromécanique. L'avantage de la méthode utilisée est qu'elle introduit une anisotropie intrinsèque due à la texture cristallographique et aux modes de déformation par glissement de dislocations sur les plans denses de la maille élémentaire CFC. Par construction, le modèle incorpore des paramètres matériau aux différents niveaux qui le constituent, dont la stratégie d'identification a été discutée précédemment.
Ce chapitre propose une confrontation supplémentaire de la modélisation entreprise sur des essais monotones biaxiaux en utilisant une éprouvette « en croix ». La géométrie de celle-ci permet de mettre en lumière l'anisotropie du matériau en effectuant des chargements multiaxiaux sur les deux directions longitudinale et transverse. Ce passage à une structure met également en lumière le problème de la séparabilité des échelles, nécessaire pour la construction du modèle d'alliage DS « parfait », mais qui n'est pas vérifiée dans la réalité. En d'autres termes, il n'y a pas assez de grains dans une pièce pour homogénéiser le champ mécanique, par des lois homogènes ou des approches en champ moyen. Le montage expérimental permet alors de tester le modèle à différents niveaux.

4.1 Matériel et méthode

Le Centre des Matériaux d'Evry est équipé d'une machine biaxiale cruciforme (INSTRON Type 8800) (voir figure 4.1). Elle est principalement utilisée pour réaliser des essais de fatigue oligocyclique jusqu'à très haute température afin d'étudier les mécanismes de déformation plastique et de propagation de fissures [Wang et al., 2013]. Elle a également été utilisée pour observer l'écaillage d'un revêtement céramique autour/au sein d'un défaut (cloque) [Sapardanis et al., 2016] sous chargement monotone. Le dimensionnement de ce moyen d'essai est essentiellement adapté à l'étude des alliages métalliques, avec des températures maximales de l'ordre de $1200\,°C$ (ce qui est utile pour les superalliages à base nickel) et une capacité des vérins de $100\,kN$. Dans ce chapitre, les essais sont réalisés à température ambiante afin de ne pas surcharger le montage expérimental. Le comportement mécanique du matériau sera alors représentatif des zones où la température ne dépasse pas $650\,°C$, comme expliqué au chapitre 1.

La machine est composée de quatre vérins hydrauliques dont l'axe fait un angle de $45°$ par rapport à l'horizontale. Il est possible de piloter chaque vérin indépendamment. Un pilotage dit *modal* est également disponible, permettant une coordination des vérins opposés deux à deux



a. b.

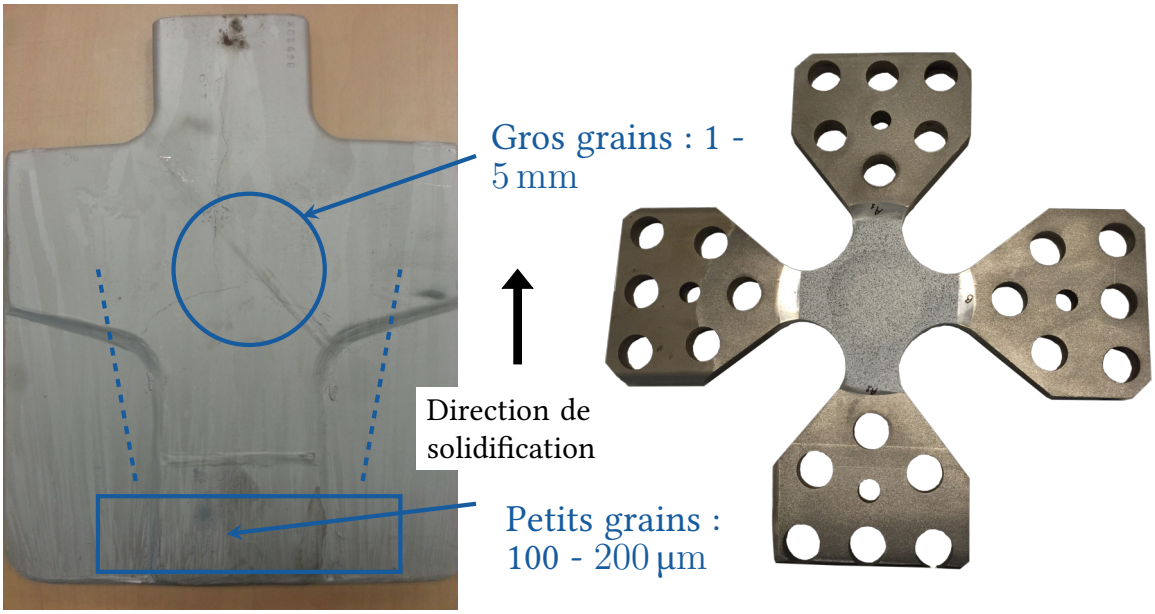
Figure 4.1 – *a. Photographie du montage expérimental sur la machine biaxiale cruciforme du Centre des Matériaux (INSTRON Type 8800). b. Schéma descriptif de la coordination des vérins lors d'un pilotage dit « modal ».*

(voir le schéma de la figure 4.1). L'asservissement en translation permet dans ce cas de conserver l'éprouvette centrée en un point fixe défini en début d'essai. Ensuite, l'écartement relatif des vérins permet d'imposer directement un déplacement sur l'éprouvette ou bien d'effectuer un asservissement sur une charge à appliquer. Dans cette étude, nous privilégions les chargements pilotés en déplacements « vérins » (on parlera aussi des déplacements « machine » dans la suite), à cause du faible module d'écrouissage observé sur le DS200+Hf à $650\,°C$.

4.1.1 Caractéristiques de l'éprouvette

La fabrication de l'éprouvette a été faite par Safran Aircraft Engines à Gennevilliers. Une géométrie spécifique des moules a été conçue, permettant une solidification dirigée de meilleure qualité par rapport à la géométrie utilisée pour les éprouvettes monocristallines (e.g. des études précédentes sur l'AM1). L'industriel partenaire a également réalisé les mêmes traitements thermiques que pour les aubes en DS200+Hf. La figure 4.2 montre un brut de coulée traité thermiquement qui a été fourni pour la thèse.

La taille de grains est petite (100-$200\,\mu m$) dans la zone correspondant au début de solidification (rectangle bleu sur la figure 4.2) comme discuté en début de chapitre 1. Cette taille croît rapidement lorsqu'on se rapproche de la zone utile (cercle bleu sur la figure 4.2), ce qui donne à la microstructure une morphologie « en éventail ». Cela n'est pas un biais introduit par la géométrie complexe des moules puisque cette même structure a été observée par **Mataveli Suave** sur de simples plaques rectangulaires en DS200+Hf [Mataveli Suave, 2017]. L'usinage des éprouvettes a été réalisé au Centre des Matériaux de Mines ParisTech. L'éprouvette cruciforme est présentée en figure 4.2b. Deux réductions de section sont introduites afin de concentrer la déformation au sein d'une cuvette circulaire de diamètre $36\,mm$ située au centre. Au centre, l'épaisseur de matière est de $1{,}5\,mm$, ce qui laisse à penser que les grains sont traversants. En figure 4.3, nous présentons les cartes de la déformation, qui illustrent l'influence de cette



a. b.

Figure 4.2 – *a. Photographie d'un brut de coulée DS200 traité thermiquement réalisé par Safran Aircraft Engines. b. Eprouvette cruciforme en DS200 usinée à partir du brut de coulée au Centre des Matériaux.*

cavité centrale pour un matériau élastique isotrope (module d'Young égal à 100 000 MPa et le coefficient de poisson à 0,3) lors d'une sollicitation biaxiale proportionnelle de rapport 1 (*i.e.* un même écartement des vérins selon les deux axes).

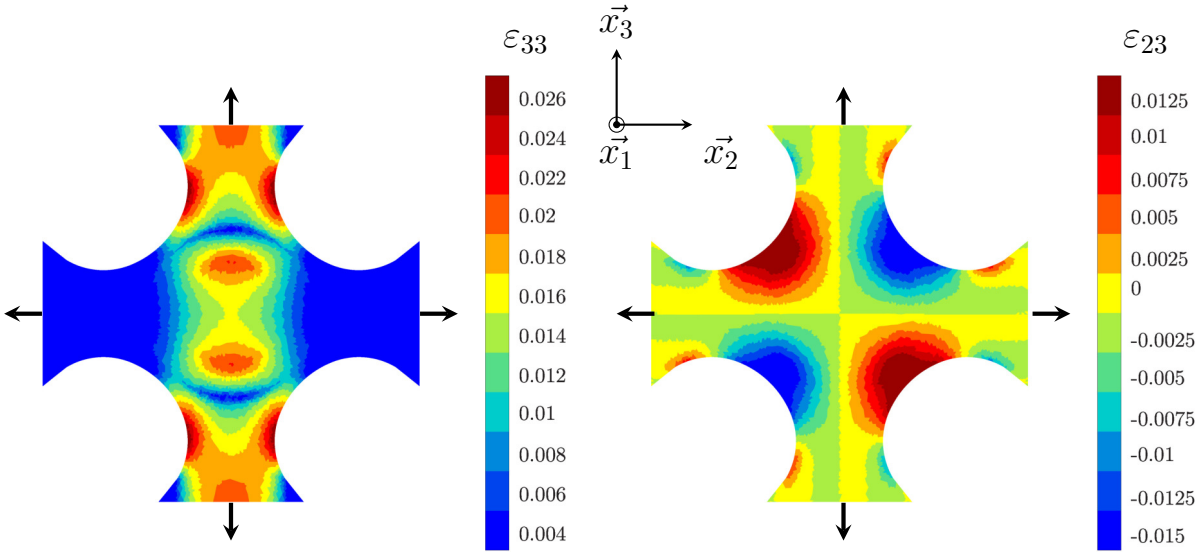


Figure 4.3 – *Champs des déformations de traction et de cisaillement au sein d'une éprouvette cruciforme avec une cavité centrale lors d'un chargement biaxial proportionnel de rapport* 1 *pour un comportement isotrope linéaire élastique.*

Nous observons que la déformation des bras au niveau de la première réduction de section est non négligeable. Pour le cas DS, on s'attend à une dissymétrie du champ induit par l'orthotropie du matériau. Sur des calculs tests élastoplastiques avec la loi en β, on aperçoit une localisation non négligeable de la déformation plastique au niveau des bras « transverses » de l'éprouvette (voir les résultats des simulations du chapitre 5). Cette zone présente également des joints de grains. Nous avons préféré réduire le niveau de chargement entre les deux axes pour éviter une rupture prématurée, en notant par ailleurs que, même pour un chargement globalement uniaxial, c'est-à-dire qu'un effort est appliqué sur un seul axe, la sollicitation est multi-axiale au centre à cause de la cavité.
Avant de réaliser les essais, les surfaces dans la zone utile de chacune des deux éprouvettes ont été polies puis attaquées chimiquement (eau régale pendant $3\,\mathrm{min}$) pour contrôler l'aspect colonnaire de la microstructure, la taille des grains, … La figure 4.4 illustre l'ampleur du grossissement des grains durant la solidification. Pour finir, moins de dix grains sont observés dans la zone utile. De plus, la grande majorité d'entre eux semblent avoir une taille suffisante pour traverser entièrement l'éprouvette et être visibles des deux côtés (Fig. 4.4).

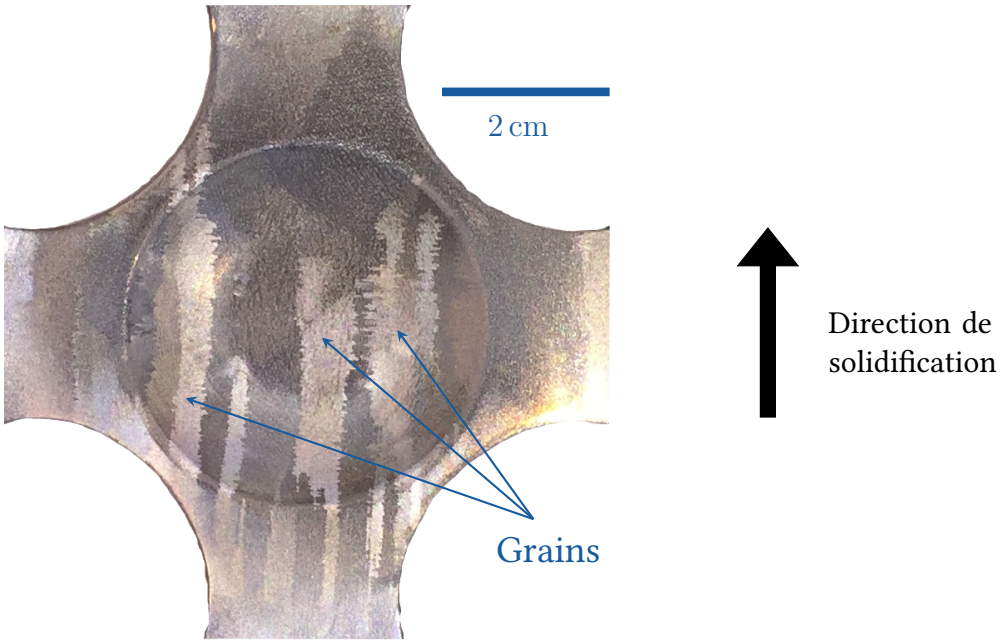


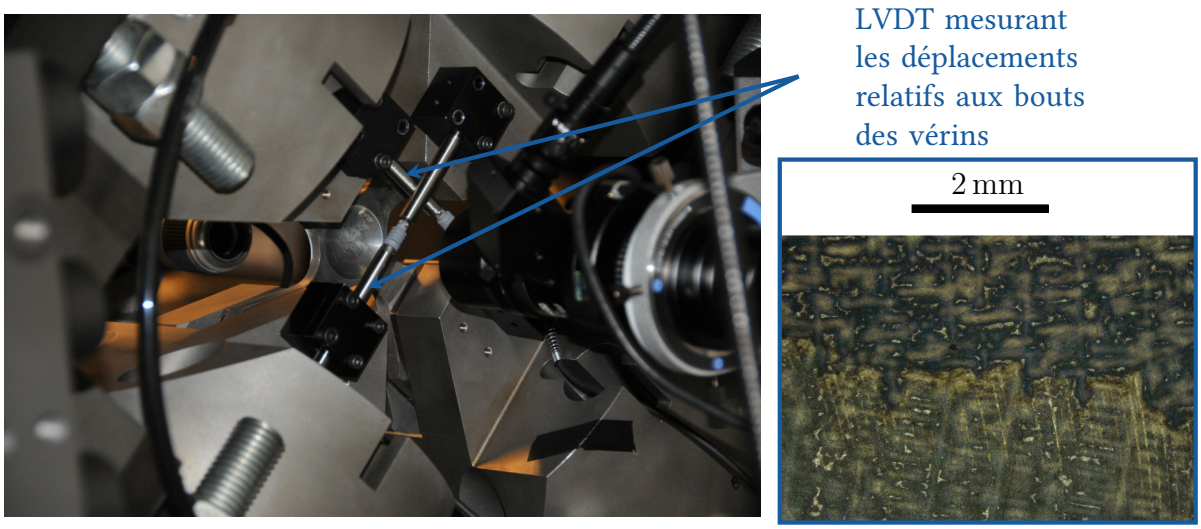
Figure 4.4 – *Photographie d'une face d'une éprouvette cruciforme en DS200 après une préparation de la surface : polissage jusqu'à* $1\,\mu\mathrm{m}$ *suivi d'une attaque chimique à l'eau régale (*$\frac{1}{3}$ *HNO*$_3$ + $\frac{2}{3}$ *HCl, rapports volumiques) pendant* $3\,\mathrm{min}$.

Il est prévu de réaliser la carte définissant précisément la géométrie et l'orientation cristalline de ces grains, afin de pouvoir réaliser une simulation déterministe de notre éprouvette. Ce travail n'a pas pu être effectué dans le cadre de la thèse faute de temps.

Le constat sur la taille des grains confirme la sortie du cadre théorique d'application des méthodes qui implique la séparabilité des échelles locale (grain) et globale (structure). Le modèle à champs moyens qui a été développé n'est donc capable de simuler qu'un comportement moyen autour duquel graviteront les champs réels, qui seront dépendants de la microstructure locale. Les essais mécaniques réalisés vont chercher à répondre à cette question : quel niveau de dispersion la microstructure cristalline génère-t-elle d'une éprouvette à l'autre sur le champ des déformations ?

4.1.2 Instrumentation de l'essai

Les essais sont instrumentés de manière à observer des champs de déplacement puis de déformation dans la zone utile. Sur la face arrière de l'éprouvette (figure 4.5), l'attaque chimique est conservée et permet d'observer à l'aide d'une caméra une zone centrée sur un joint de grains. Les hétérogénéités du matériau à cette échelle serviront de mouchetis naturel afin de mener une corrélation d'images pour déduire les champs de déplacement. Cela pourrait confirmer un effet négligeable de la tortuosité du joint sur une localisation de la déformation.



(a) **Montage arrière** (b)

Figure 4.5 – *(a) Photographie de l'arrière du montage expérimental réalisé sur la machine biaxiale cruciforme du Centre des Matériaux montrant le positionnement des LVDT. (b) Exemple d'image acquise par le microscope Keyence VHX-1000 équipé d'un objectif Z50 (grossissement* $\times 50$*).*

Une image de la zone observée par un microscope Keyence VHX-1000 équipé d'un objectif Z50 (grossissement $\times 50$) sur la face arrière de l'éprouvette est illustrée en figure 4.5.b. Les différentes phases observées (carbures, bras de dendrites secondaires, ...) ainsi que la position du joint de grains ont déjà été introduits au début du manuscrit (voir la figure 1.1). La résolution de l'image est de 1600×1200 pixels, ce qui donne une taille du pixel de l'ordre de $3{,}2\,\mu\mathrm{m}$. Par ailleurs, deux LVDT sont fixés sur les mors et permettent une seconde mesure des déplacements imposés, à proximité immédiate de l'éprouvette. Durant la phase d'étalonnage, l'erreur commise sur le déplacement était de l'ordre de $1\,\mu\mathrm{m}$. Ce déplacement supplémentaire permettra d'isoler une possible raideur machine. La figure 4.6 montre le montage réalisé sur la face « avant ».

Un microscope Keyence VHX-1000 équipé d'un objectif Z00 (grossissement $\times 5$) est utilisé afin d'acquérir une image « Macro » de la zone utile de l'éprouvette, sur laquelle un mouchetis peinture a été réalisé. Deux informations sont recherchées par l'acquisition d'une telle image. Premièrement, nous souhaitons mesurer les déplacements réellement appliqués sur l'éprouvette à proximité des bras afin de pouvoir les comparer à la mesure des LVDT. Deuxièmement,

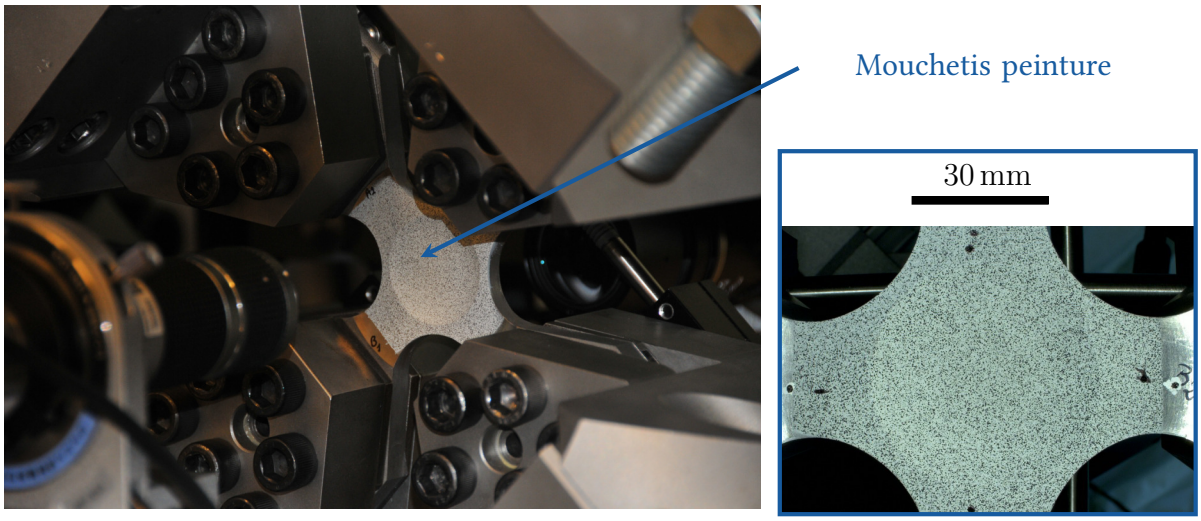


Figure 4.6 – *Photographie de l'avant du montage expérimental réalisé sur la machine biaxiale cruciforme du Centre des Matériaux montrant une image acquise par le microscope Keyence VHX-1000 équipé d'un objectif Z00 (grossissement* $\times 5$*).*

un champ de déformation dans la zone utile doit nous permettre de mettre en évidence (ou non) l'effet des grains. La résolution de la caméra étant la même que pour les images « Micro » (1600×1200 pixels), la taille d'un pixel se situe aux alentours de $42\,\mu\text{m}$. Les grains en surface ayant été observés préalablement par une attaque chimique, cette résolution permet d'avoir entre 50 et 100 pixels dans la largeur d'un grain. Nous avons supposé que cette densité de pixels est à même d'illustrer, après corrélation d'images, une fluctuation du champ de déformation induite par la texture cristallographique.

La cadence d'acquisition des images est égale à une prise de vue toutes les $2\,\text{s}$. Elle est contrôlée sur les deux faces par un générateur d'onde fournissant un signal carré d'amplitude $5\,\text{V}$. La photo est déclenchée lors de la descente du front d'onde. Afin de pouvoir corréler le chargement imposé par la machine et les photos acquises, ce signal est enregistré dans le fichier final de sortie de la machine. Il suffit ainsi de trier uniquement les temps où une image a été prise et de supprimer les photographies prises avant le lancement de l'essai pour synchroniser les deux types d'information.

4.1.3 Trajet de chargement étudié

Trois variables définies sur chaque axe de la machine cruciforme peuvent servir au pilotage : le déplacement relatif des vérins, le déplacement mesuré par le LVDT qui est ajouté à proximité de l'éprouvette (voir la figure 4.5) et l'effort résultant mesuré par la cellule de force. Pour l'essai qui est exploité dans la suite, l'axe où la sollicitation est maximale correspond à la direction transverse de l'éprouvette DS. On cherche ainsi à exacerber les possibles hétérogénéités intergranulaires. De plus, c'est l'axe sur lequel les images « Macro » donnent l'écartement le plus large (1600 pixels contre 1200 dans la direction longitudinale).

Nous réalisons un premier cycle de traction puis compression en déplacement imposé avec une

consigne de charge nulle sur l'axe longitudinal (trait rouge sur les images 4.8 et 4.7). Ce chargement simple permet de tester la bonne corrélation essai/calcul, comme par exemple, en regardant la cohérence du module apparent transverse et du coefficient de Poisson longitudinal. Le déplacement transverse est choisi suffisamment grand pour observer une partie plastique en traction comme en compression. Ensuite, une charge longitudinale de traction de $18\,\mathrm{kN}$ est appliquée tout en maintenant une charge constante dans la direction transverse. Cette valeur imposée représente un tiers de la charge maximale mesurée dans la direction transverse lors de la précédente traction. On réalise alors une seconde boucle de chargement en traction puis compression avec pour consigne une force constante dans la direction longitudinale (trait bleu sur les images 4.8 et 4.7). Dans un troisième temps, une compression longitudinale est appliquée jusqu'à une valeur cible de $-24\,\mathrm{kN}$. Une dernière boucle de traction puis compression dans la direction transverse est alors réalisée en déplacement imposé avec un effort longitudinal constant (trait vert sur les images 4.8 et 4.7). Des premiers tests en régime élastique ont permis de caractériser la rigidité « machine ». Celle-ci doit être prise en compte, la déformation des lignes entraînant des différences non négligeables entre les déplacements souhaités et les déplacements lus au niveau des capteurs LVDT. La rigidité du matériau est telle qu'il est nécessaire d'imposer une charge de $60\,\mathrm{kN}$ pour atteindre le seuil de plasticité (la sécurité de la machine s'activant lorsque la charge atteint $100\,\mathrm{kN}$).

Nous avons souhaité conserver un contrôle des rampes qui utilise les données propres à la machine dans un souci de stabilité du signal : lors d'essais préliminaires avec des trajets pilotés directement par le capteur LVDT, certaines pertes du signal ont en effet causé des mouvements catastrophiques des vérins. Le pilotage est malgré tout réalisé sur le déplacement transverse mesuré par le capteur LVDT : l'introduction d'un évènement dans le programme de pilotage permet en effet de passer à l'étape suivante du chargement lorsque la valeur délivrée par le capteur LVDT atteint une valeur cible.

4.1.4 Conditions aux limites de la modélisation associée

Le premier calcul que nous allons réaliser utilise un matériau DS générique simulé à l'aide de la règle en β. Le matériau est donc orthotrope transverse, si bien que les symétries par rapport aux axes $\vec{x}_2$ et $\vec{x}_3$ autorisent à ne considérer qu'un huitième d'éprouvette. Le maillage (Fig. 4.9) comporte 8452 éléments quadratiques (tétraèdres à 10 nœuds) et $14\,170$ nœuds. Les conditions aux limites sont reportées respectivement en Fig. 4.9a et Fig. 4.9b sur des coupes ($\vec{x}_2$,$\vec{x}_3$) et ($\vec{x}_1$,$\vec{x}_3$). Les paramètres sont ceux de la loi de comportement identifiée pour le DS200+Hf à l'ambiante (tenseur d'élasticité local à $20\,^\circ\mathrm{C}$ et mêmes paramètres pour la plasticité qu'à $650\,^\circ\mathrm{C}$) avec 30 phases cristallographiques équiprobables en chaque point de **Gauss**.

Pour la définition des déplacements transversaux, il est nécessaire d'incorporer la rigidité de la machine. Une première partie de la déformation « machine » s'extrait facilement de la différence mesurée entre l'information que donne le vérin et le capteur LVDT pour une force donnée. On trouve alors une rigidité propre à chaque ligne de vérin de $685{,}8\,\mathrm{kN\,mm^{-1}}$. Celle-ci peut être représentée par une couche d'éléments, de longueur L_e et de surface totale S_e égale à la section du bras de l'éprouvette, qui présentera un comportement élastique équivalent en choisissant un coefficient de Poisson nul, et un module de Young E_m tel que :

$$E_m = \frac{RL_e}{S_e} \tag{4.1}$$

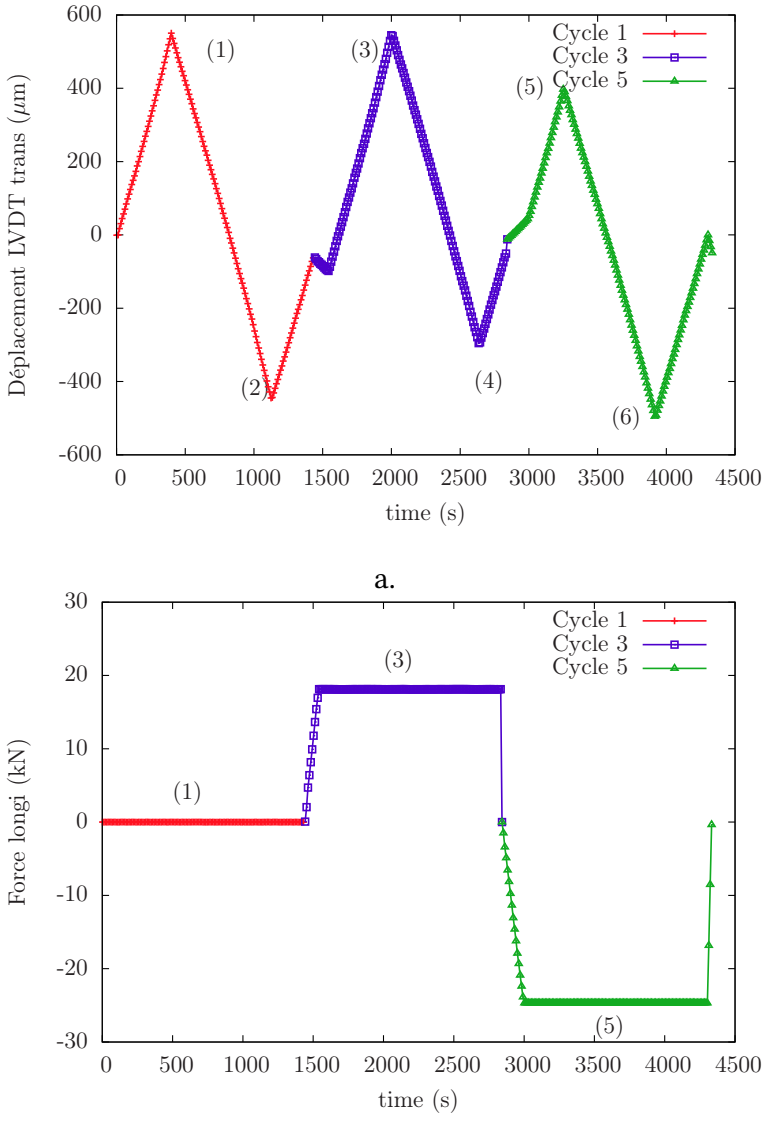


Figure 4.7 – *Représentation des trajets de chargement imposés sur l'éprouvette DS à température ambiante : (a) déplacement sur le LVDT transverse et (b) force longitudinale appliqués en fonction du temps.*

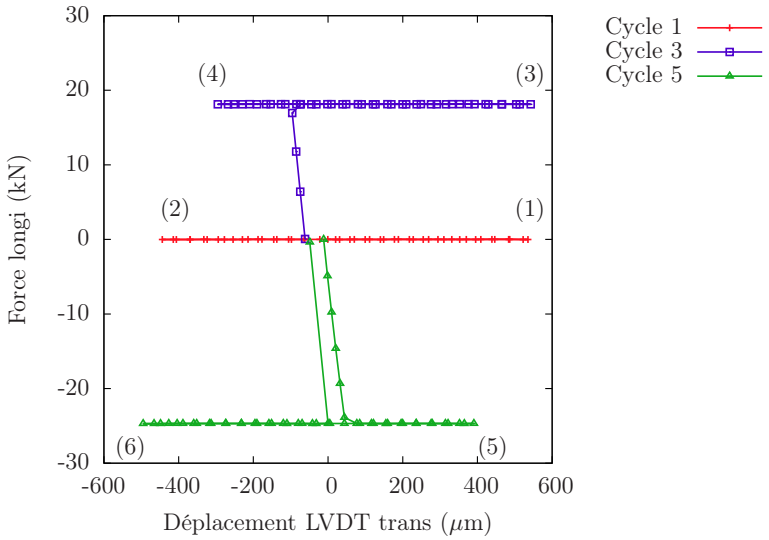


Figure 4.8 – *Représentation des trajets de chargement imposés sur l'éprouvette DS à température ambiante : force longitudinale en fonction de la mesure de déplacement relatif obtenue sur le LVDT transverse.*

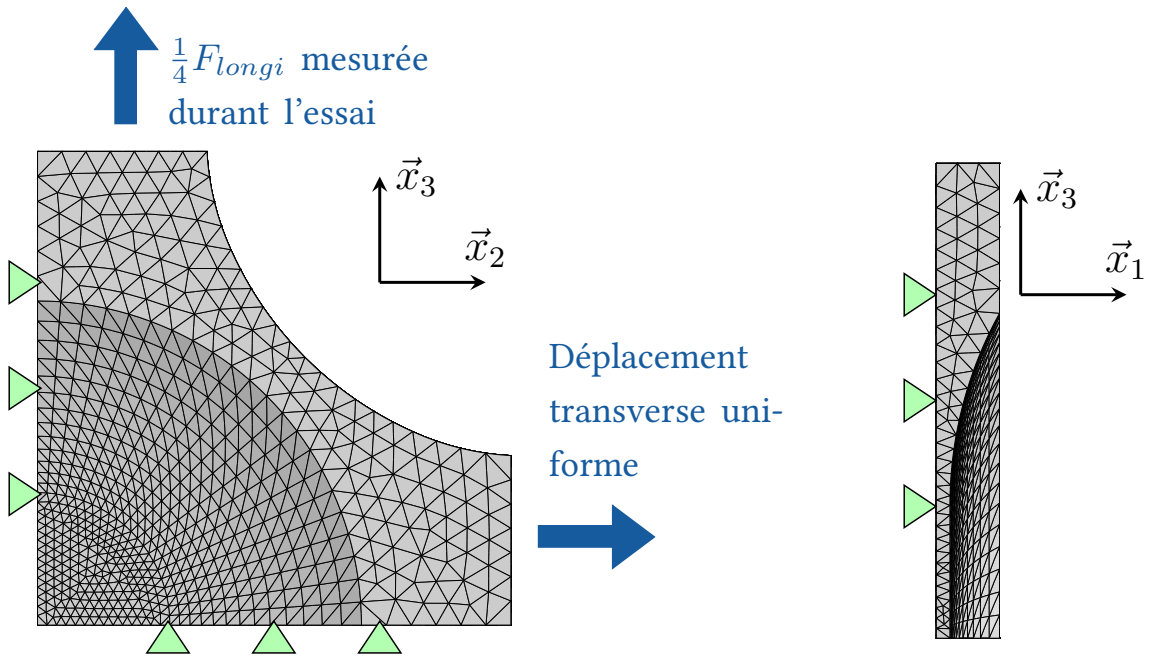


Figure 4.9 – *Maillage utilisé pour le simulation numérique de l'essai sur éprouvette cruciforme en DS200 en utilisant la règle en β. Des déplacements nuls sont imposés sur certaines faces afin de rendre compte des symétries du problème.*

où R représente la rigidité de la machine. En utilisant comme conditions aux limites les déplacements donnés par le vérin sur la surface extérieure de l'élément, le déplacement résultant sur le bord extérieur de l'éprouvette doit être égal à celui mesuré par le capteur LVDT. Lorsque les premiers calculs ont été réalisés avec ce système, nous avons observé une force largement surestimée par rapport à l'expérience dans le domaine élastique. La rigidité machine calculée à partir des données du capteur LVDT semble être trop élevée par rapport à la réalité.

Une première solution consiste à associer la différence de module apparent entre la simulation et l'expérience à une seconde « déformation de la machine » se situant entre la mesure du LVDT et l'éprouvette. Il suffit alors de modifier le module d'Young des éléments « machine » pour que les courbes essai/calcul se superposent dans le régime élastique. Nous n'adopterons pas cette méthode car dans ce cas, on élimine toute erreur possible du modèle en élasticité et on peut également sous-estimer les écarts en plasticité. De fait, il est fort probable que la règle en β ne soit pas parfaitement adaptée puisque la taille des grains dans la zone utile va rendre la solution dépendante de l'orientation cristallographique des quelques grains présents. C'est justement ce qu'on cherche à vérifier.

Pour éviter l'introduction d'une telle correction, nous avons utilisé l'extensométrie virtuelle à l'aide des images « Macro » acquises durant l'essai. Une méthode efficace consiste à créer une boîte sur l'image de référence, centrée sur le point où on souhaite disposer d'une mesure. La taille de celle-ci dépend directement du mouchetis utilisé. Dans notre cas, cette boîte a pour dimensions 30×30 pixels, ce qui permet d'assurer une distribution des niveaux de gris suffisamment large. Un algorithme cherche les positions de la boîte pour la série d'images prises durant l'essai. Il s'agit donc d'une corrélation locale, consistant à maximiser la fonction d'inter-corrélation h :

$$h(\vec{u}) = \int_{\Omega} f(\vec{x})g(\vec{x}+\vec{u})d\vec{x} \tag{4.2}$$

où $\vec{u}$ représente un mouvement de corps rigide translatant le domaine initial Ω (la boîte). Ce produit de convolution est évalué efficacement en utilisant un algorithme FFT (Fast Fourier Transform), le calcul se ramenant dans l'espace de Fourier à des opérations simples (le produit de convolution se ramène à un produit « classique » dans cet espace). En corrélant les déplacements de deux boîtes centrées sur l'emplacement où les conditions aux limites du calcul sont appliquées, un déplacement relatif « réel » subi par l'éprouvette est calculé. Dans la suite, la position choisie se situe à l'endroit de section minimale du bras transverse. C'est l'intervalle le plus large qu'il nous a été permis de suivre de cette manière. La méthode, se rapprochant d'un suivi de marqueurs (les marqueurs étant alors des boîtes contenant une fonction discrète issue du mouchetis), permet de réaliser des calculs sur une faible partie de l'image (900 pixels contre les 2 Méga pixels que contient l'image). Nous avons utilisé le logiciel *Ariane* développé au Centre des Matériaux [Teissedre, 2016] et s'appuyant sur les librairies *Python* disponibles (*numpy*, *scikit*, ...). On peut très bien obtenir cette information avec un post-traitement d'une corrélation d'images complète. Nous avons vérifié que les résultats issus du suivi de marqueurs étaient très semblables à ceux provenant du logiciel commercial *VIC2D* (l'erreur est inférieure à $10\,\mu\text{m}$).

La figure 4.10 permet de localiser les points de mesure sur chaque bras de l'éprouvette, et de comparer les évolutions des différents déplacements.

Une différence significative est observée entre les trois mesures pour les déplacements selon l'axe transverse. Nous vérifions par contre que les trois mesures du déplacement longitudinal se superposent lors du premier cycle. Ceci est dû au fait que la force est nulle dans cette

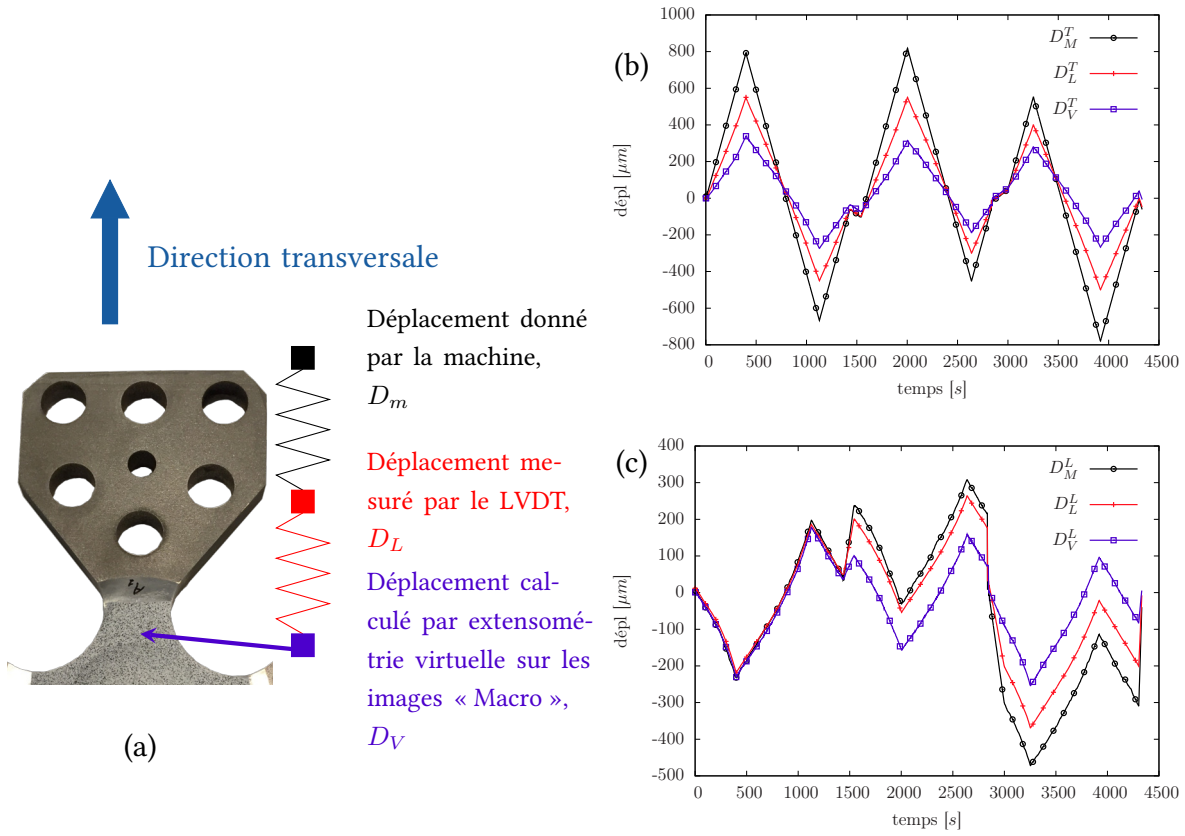


Figure 4.10 – *(a) Localisation des différents points de mesure du déplacement : déplacement machine (D_M), déplacement LVDT (D_L) et déplacement issu de la corrélation d'images (D_V). (b) Evolution en fonction du temps du déplacement en sens travers (D_M^t imposé). (c) Evolution en fonction du temps du déplacement en sens long (force imposée).*

direction, si bien que les « ressorts » ne s'allongent pas. A partir du deuxième cycle, il y a des contraintes résiduelles dans l'éprouvette, si bien que les mesures deviennent différentes. Nous avons considéré que ceci valide la méthode de mesure par extensométrie virtuelle. Dans la suite, le déplacement expérimental utilisé sera celui qui est obtenu par corrélation locale d'images D_V.

4.2 Résultats expérimentaux

4.2.1 Analyse des données globales

Maintenant que le cadre du travail expérimental et numérique a été discuté, cette partie traite de la comparaison des résultats. Nous rappelons que les chargements consistent à imposer une charge dans la direction longitudinale et un déplacement dans la direction transverse. Les différents rapports de biaxialité réalisés expérimentalement et imposés dans la simulation associée ont été présentés sur la figure 4.8, à cela près que le déplacement utilisé dans la simulation se réfère aux mesures par corrélation d'images plutôt qu'aux données du capteur LVDT. La figure 4.11 confronte la simulation numérique aux résultats sur les variables globales de déplacement et de force.

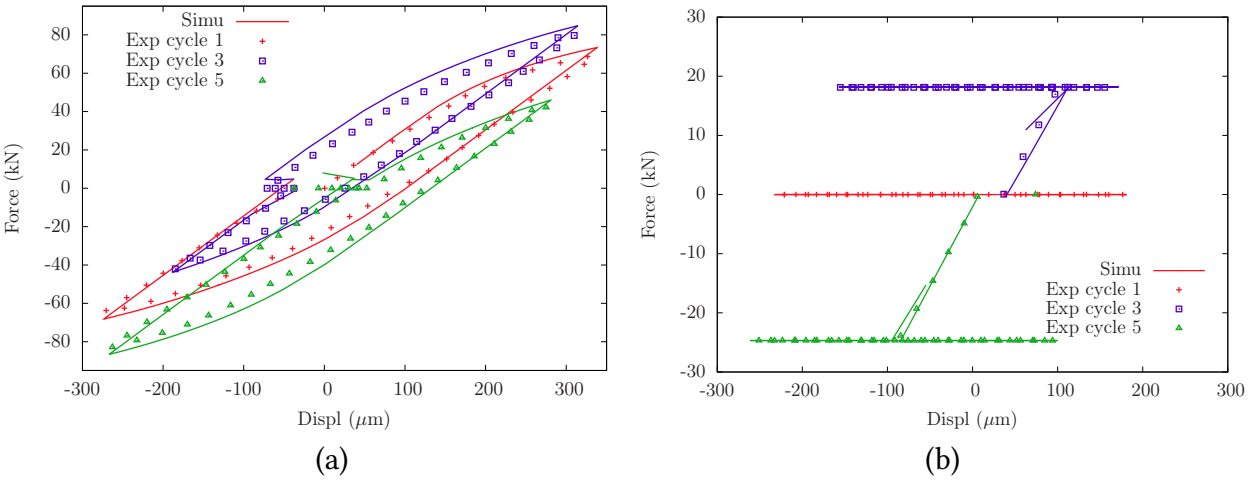


Figure 4.11 – *Comparaison des trajets force-déplacement dans les directions transverse (a) et longitudinale (b) pour l'expérience et la simulation associée.*

On observe une bonne corrélation sur l'ensemble des trajets entrepris, ce qui démontre l'excellente capacité de prévision du modèle. En effet, aucun ajustement de ses paramètres n'a été nécessaire pour atteindre ce résultat. Les modules apparents résultants ainsi que la force maximale appliquée sur la première traction dans l'axe transverse présentent respectivement une erreur relative respectivement de $5{,}31\,\%$ et $5{,}52\,\%$. Notons également que dans la direction longitudinale, les erreurs sont beaucoup plus faibles (environ $1\,\%$ pour les déplacements maximum et minimum de la première traction). Cette observation confirme le fait que tous les grains ont un comportement identique dans la direction de solidification. Indépendamment du nombre de grains présents dans la zone utile et de leur orientation, la réponse longitudinale reste inchangée. Par contre, dès qu'on entreprend des chargements biaxiaux, des écarts apparaissent selon cet axe car les grains n'ont pas la même réponse transverse, et qu'il y a des contraintes résiduelles. L'écart entre les deux courbes expérimentale et simulée selon l'axe

transverse reste toutefois contenu dans les incertitudes matériau (mesure, microstructure, ...). Finalement, on illustre par cet essai l'efficacité du modèle développé pour traduire la réponse globale du DS200+Hf à température ambiante lors de chargements biaxiaux complexes.

4.2.2 Mesure des champs locaux de déformation

La corrélation d'images est un outil moderne permettant d'accéder non plus uniquement à des déformations locales (jauges de déformation) mais aux champs de déplacement dans une fenêtre d'intérêt (d'où on peut déduire les champs de déformation). Cette méthode de mesure est devenue standard pour l'étude du comportement mécanique. Les besoins pour mener à bien ces mesures sont : une caméra CCD, une fenêtre d'intérêt contenant une hétérogénéité optique surfacique naturelle ou artificielle et un logiciel de corrélation d'images.

Mouchetis aléatoire Pour l'essai étudié, nous avons généré un mouchetis de peinture noire sur un fond blanc à l'aide d'un aérographe. Cet outil permet d'assurer une taille de gouttelettes projetées suffisamment petite (de l'ordre de $60\,\mu\mathrm{m}$ dans notre cas). Pour les images « Micro », les hétérogénéités chimiques visibles sur la surface brute sont exploitées comme un mouchetis naturel.

Techniques de corrélation d'images Nous détaillons ici les choix qui ont été faits sur le logiciel commercial *VIC 2D* disponible au Centre des Matériaux. La description est orientée du point de vue utilisateur car nous avons utilisé le logiciel sans originalité particulière. Rappelons premièrement que la fenêtre d'intérêt, de forme quelconque, est découpée en fenêtres de forme carrée et de dimension l (voir la figure 4.12).

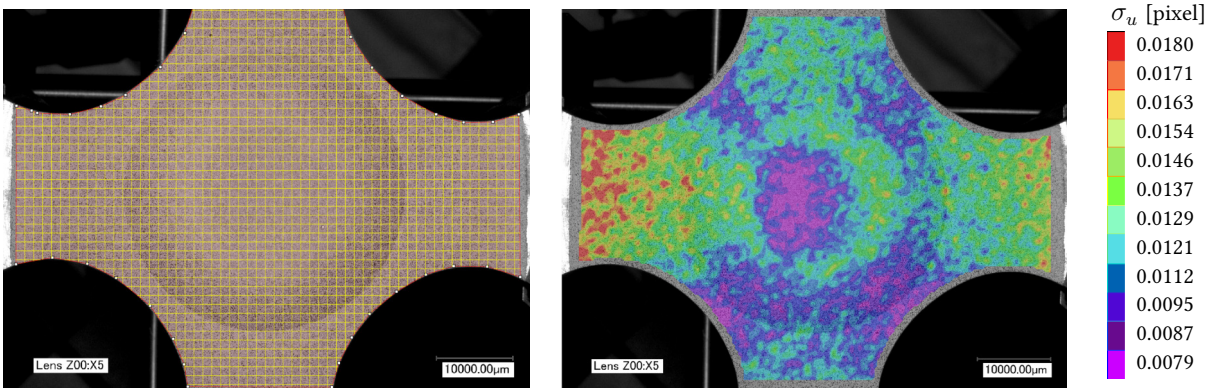


Figure 4.12 – *Fenêtre d'intérêt avec une taille des fenêtres de 27 pixels (et un pas de recouvrement de 9 pixels) choisie pour effectuer les mesures de champ de déplacement par corrélation d'images (*VIC 2D*) et une cartographie de l'incertitude en déplacement après calcul.*

On recherche d'une part à avoir « un maillage » suffisamment fin pour obtenir une résolution spatiale la plus grande possible sur les champs résultants [Robert and Wattrisse, 2009]. D'autre part, chaque zone de travail (les « éléments du maillage ») doit contenir une distribution de niveaux de gris suffisante pour assurer une bonne corrélation. Par exemple, il faut s'affranchir d'une possibilité d'avoir deux fenêtres définies par le même motif discret. Le logiciel *VIC 2D* nous assiste dans cette étape en estimant avant essai une incertitude sur le déplacement, σ_u, en

fonction de l. Pour une incertitude maximale estimée avant essai de 0,02 pixel (souvent située sur les bords de la fenêtre), la taille des fenêtres choisie est de 27×27 pixels (voir la figure 4.12). Cela représente une incertitude de $0{,}84\,\mu\mathrm{m}$. On définit également un recouvrement entre deux fenêtres. Dans la procédure en usage au Centre des Matériaux, le recouvrement est égal au tiers de l, c'est ce qui est appliqué dans nos mesures. L'algorithme d'inter-corrélation consiste à chercher chaque fenêtre sur une image déformée à l'instant t. Dans notre cas, la procédure locale est réalisée de manière indépendante sur chaque sous-domaine. D'autres logiciels tels que *Correli Q4* optent pour une optimisation globale. L'approche introduit alors des relations issues de la mécanique ou cherche à minimiser un résidu de corrélation global [Hild and Roux, 2011]. Soit f la fonction discrète donnant en chaque point $\underline{x}$ dans un domaine Ω un scalaire représentant le niveau de gris et g la même fonction dans l'image déformée, alors le problème consiste à minimiser une fonction coût. Le choix s'est porté sur une évaluation par moindre carrés appelée « Zero mean Sum of Squared Differences (ZSSD) » :

$$C(\underline{u}) = \int_{\Omega} \left[\left(f(\underline{x}) - \bar{f} \right) - \left(g(\underline{x} + \underline{u}) - \bar{g} \right) \right]^2 d\underline{x} \tag{4.3}$$

Ce critère peut être discrétisé sur chaque fenêtre, de manière à avoir :

$$C(\underline{u}^{(i)}) = \sum_{i \in imagettes} \left[\left(f(\underline{x}^{(i)}) - \bar{f} \right) - \left(g(\underline{x}^{(i)} + \underline{u}^{(i)}) - \bar{g} \right) \right]^2 \tag{4.4}$$

Le problème revient alors à chercher le vecteur des composantes de déplacement $\underline{u}^{(i)}$ minimisant la fonction d'inter-corrélation $C(\underline{u}^{(i)})$. Les deux fonctions f et g sont comparées à leur moyenne afin d'éviter des erreurs induites par une luminosité différente entre les deux images. Le calcul de $C(\underline{u}^{(i)})$ se fait dans l'espace réel ou en passant dans l'espace de Fourier (pour ce dernier, on maximise le produit de convolution présenté en 4.2). Pour la minimisation, les algorithmes de type **Newton-Raphson** ou **Levenberg-Marquardt** ne peuvent s'appliquer que sur des fonctions continues et dérivables. Il faut donc choisir un « lissage » des fonctions f et g introduites précédemment. Dans *VIC 2D*, des outils géométriques (des « B-splines cubiques ») sont proposés avec un certain ordre (2,4,6 ou 8). Cela fait référence au degrès de la B-spline utilisée dans l'interpolation, améliorant de manière croissante la précision de la fonction régularisée [Schreier et al., 2000]. Nous utilisons l'ordre le plus haut qui est proposé par le logiciel (appelé « 8-tap »). Une fois le champ de déplacement obtenu dans la fenêtre d'intérêt, différentes déformations peuvent être calculées. Pour notre étude, ces déformations étant inférieures à $2\,\%$ dans la zone centrale, les méthodes de calcul sont alors équivalentes ou très proches (on prendra la déformation lagrangienne).

Nous avons finalement remarqué que la taille du mouchetis était trop fine pour réaliser une bonne corrélation d'images. De fait, la taille moyenne des taches est inférieure à celle d'un pixel de $42\,\mu\mathrm{m}$: la fonction spatiale des niveaux de gris possède alors une forte fréquence. On « saute » d'une valeur à une autre pour chaque pixel. Pour les essais futurs, il est recommandé de modifier le montage expérimental sur la face avant en localisant la fenêtre d'intérêt sur une zone plus restreinte de l'éprouvette, en réalisant un mouchetis plus grossier et/ou en prenant une caméra CCD avec une plus grande résolution (celle que nous avons utilisé ne possède que 2 Méga pixels). Dans l'essai mesuré et sans traitement préalable, nous observons sur les déformations « mesurées » des motifs analogues à ceux de **Moiré** typique d'un recouvrement de spectre sur le signal (phénomènes aux hautes fréquences). En pratique, cela se traduit par des bandes sur le champ de déformation qui forment un angle proche de $45°$ et se déplacent dans la fenêtre d'intérêt. Afin d'annihiler cet artefact, nous avons introduit un filtre passe-bas pour

effacer les phénomènes aux hautes fréquences (option disponible dans *VIC 2D*) [Correlated Solutions, 2013]. Malheureusement, aucune information supplémentaire sur la forme du filtre (gaussien, ...) et ses caractéristiques ne sont fournies par le logiciel. Ce type de filtre a pour effet de « flouter » l'image, et devrait donc impacter les incertitudes [Mazzoleni et al., 2015], même si cela reste difficilement quantifiable sans plus d'information.

Mesures de champ sur les images « Macro »

La figure 4.13 illustre le résultat de la corrélation d'images sur les champs de déplacement longitudinal et transverse à l'instant de traction maximale pour la première boucle de chargement (charge nulle dans la direction longitudinale).

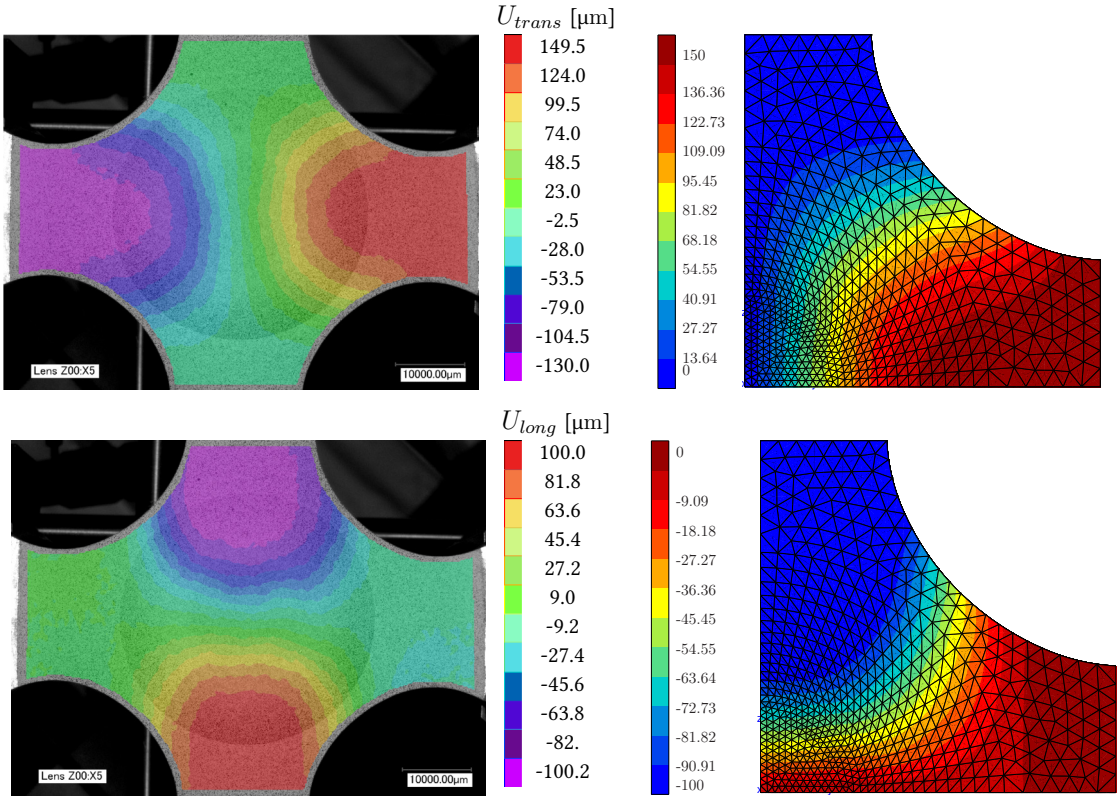


Figure 4.13 – *Champs de déplacement reconstruits avec le logiciel* VIC 2D *(gauche) et donnés par la simulation (droite) à l'instant de traction maximale pour la première boucle de chargement . Haut : déplacement transverse, bas : déplacement longitudinal.*

On remarque une bonne symétrie du champ, notamment dans la direction longitudinale. Le seuil de tolérance sur l'incertitude maximale est abaissé à σ_u = 0,02 pixel (il est de 0,5 pixel habituellement). Cela permet d'assurer ce niveau de précision sur toutes les cartographies. Afin de vérifier l'hypothèse d'un déplacement uniforme aux bords du maillage sur les simulations numériques, 24 points ont été pris à intervalle régulier sur la ligne représentant le bord du maillage. La figure 4.14 montre l'écart-type normé par la moyenne du déplacement transverse sur les deux bras au cours des trois boucles de chargement.

Sur la figure 4.14, les pics correspondent aux instants pour lesquels le déplacement est faible, si bien que la valeur relative peut devenir importante. Au contraire, l'écart-type présente des plateaux dès que le déplacement transverse est suffisant ($i.e.$ plus grand que le bruit de corré-

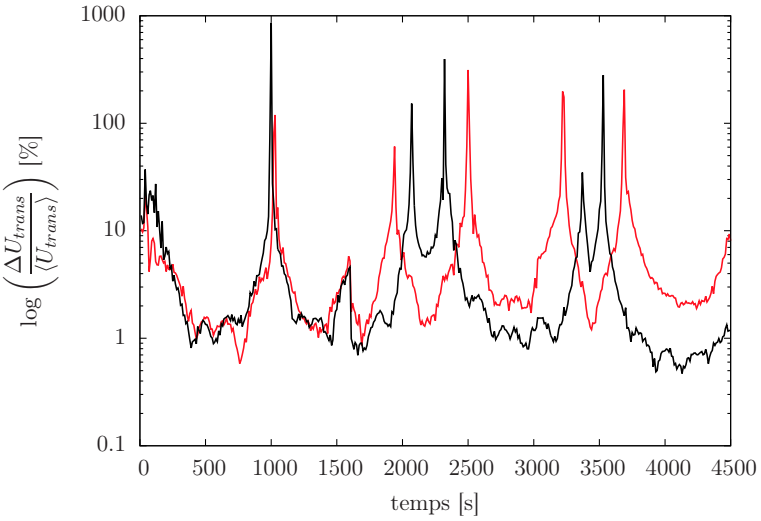


Figure 4.14 – *Evolution de l'écart-type normé par la moyenne du déplacement transverse sur les deux lignes verticales (trait rouge : côté gauche et trait noir : côté droit) où les conditions aux limites du calcul numérique sont imposées.*

lation) et il reste faible par rapport à la moyenne (de l'ordre de $2\,\%$). Nous avons donc décidé de conserver l'hypothèse d'uniformité sur le déplacement transverse imposé aux bords dans les simulations.

Les champs de déformation s'obtiennent par dérivation numérique des champs de déplacement. Pour approximer l'erreur de corrélation sur la déformation obtenue, un calcul simple consiste à partir de l'incertitude en déplacement et à la rapporter au nombre de pixels contenus dans une fenêtre ($\sigma_\varepsilon = \sigma_u l^{-1}$). On trouve alors $\sigma_\varepsilon = 7{,}4 \times 10^{-2}\,\%$. La figure 4.15 montre la confrontation essai/calcul sur le champ de déformation axiale dans la direction transverse dans le domaine élastique pour un déplacement transverse de $120\,\mu\mathrm{m}$.

Avec ce niveau de déformation, de l'ordre de 3×10^{-3} au maximum, la mesure par corrélation d'images n'est pas parfaite. De fait, l'échelle définie utilise une précision supérieure à l'incertitude estimée. Il faut donc s'attendre à obtenir un champ brouillé. Toutefois, on note le bon accord sur la valeur de déformation au centre par rapport au résultat de la simulation par éléments finis. Sur la figure 4.16, la même confrontation essai/calcul est réalisée à l'instant de traction maximale pour la première boucle de chargement. La déformation transverse, qui est maintenant de l'ordre de $1{,}5\,\%$, est suffisamment grande pour que l'incertitude n'altère plus les observations. On remarque alors des zones de déformation localisée. En ces points, la valeur de la composante axiale de déformation peut atteindre $1{,}7\,\%$, ce qui est $20\,\%$ au-dessus de la prévision de la simulation numérique. Un tel niveau de déformation nous assure une activité plastique au centre de l'éprouvette. Pour la déformation axiale dans la direction longitudinale des grains, on observe une meilleure corrélation entre l'essai et le calcul (voir la figure 4.17).

Il n'y a pas de localisation sensible dans cette direction. Nous avons vu sur un VER dans la partie 3.2 qu'une traction dans la direction transverse de l'alliage DS200 générait une déformation uniforme au sein de l'agrégat. Ce phénomène est vérifié sur la figure 4.17, car seul le gradient de déformation dû à la structure est visible. Afin d'évaluer plus quantitativement les différences entre l'essai et la simulation numérique correspondante, différentes mesures ponctuelles de la déformation ont été réalisées.

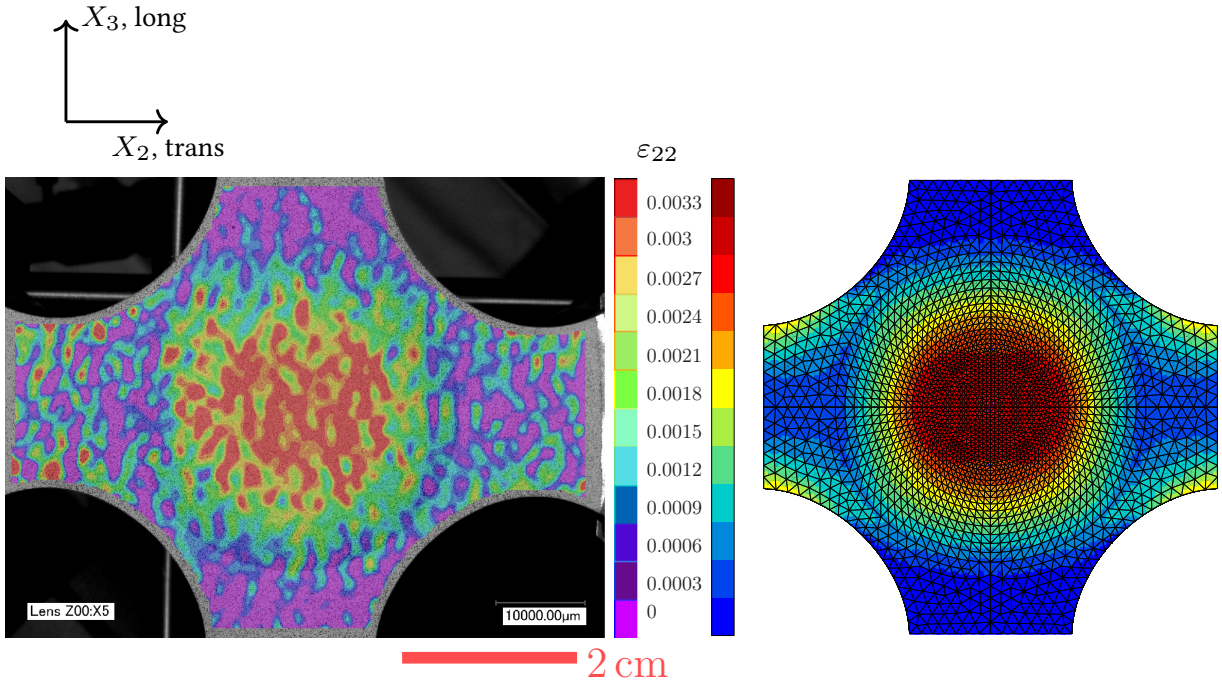


Figure 4.15 – *Champ de déformation ε_{22} (domaine élastique) pour un déplacement transverse imposé de* 120 µm *et une charge longitudinale nulle.*

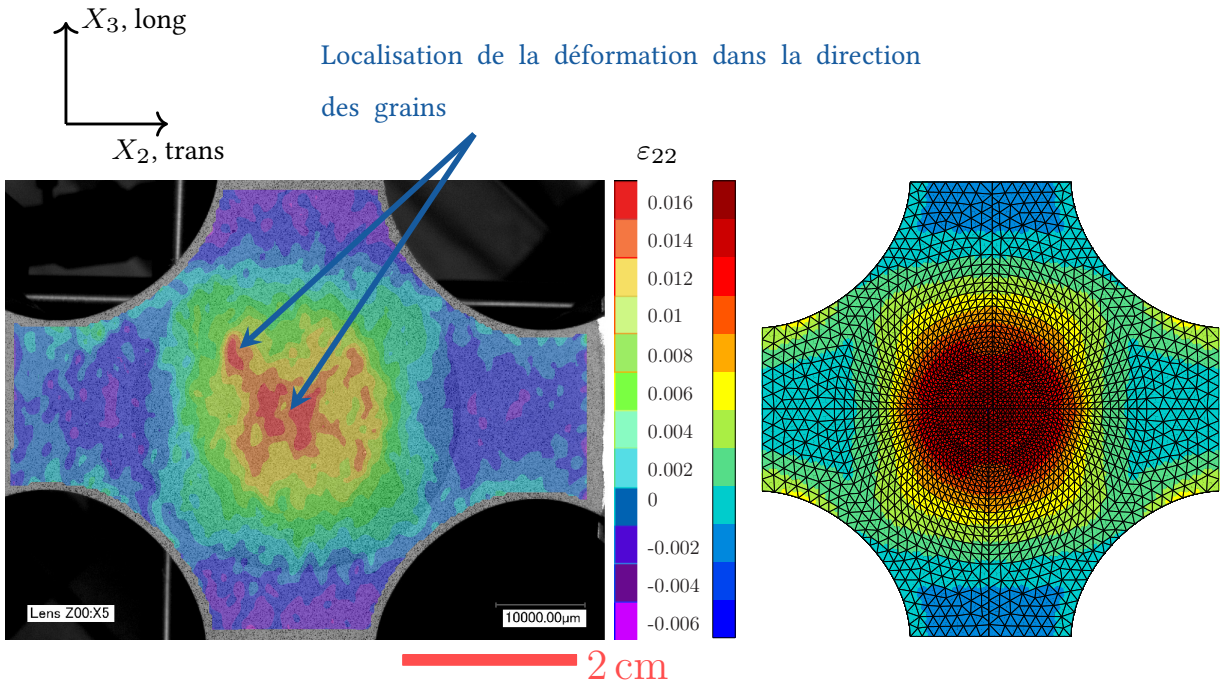


Figure 4.16 – *Champ de déformation ε_{22} pour un déplacement transverse imposé de* 320 µm *(fin de la boucle en traction) et une charge longitudinale nulle.*

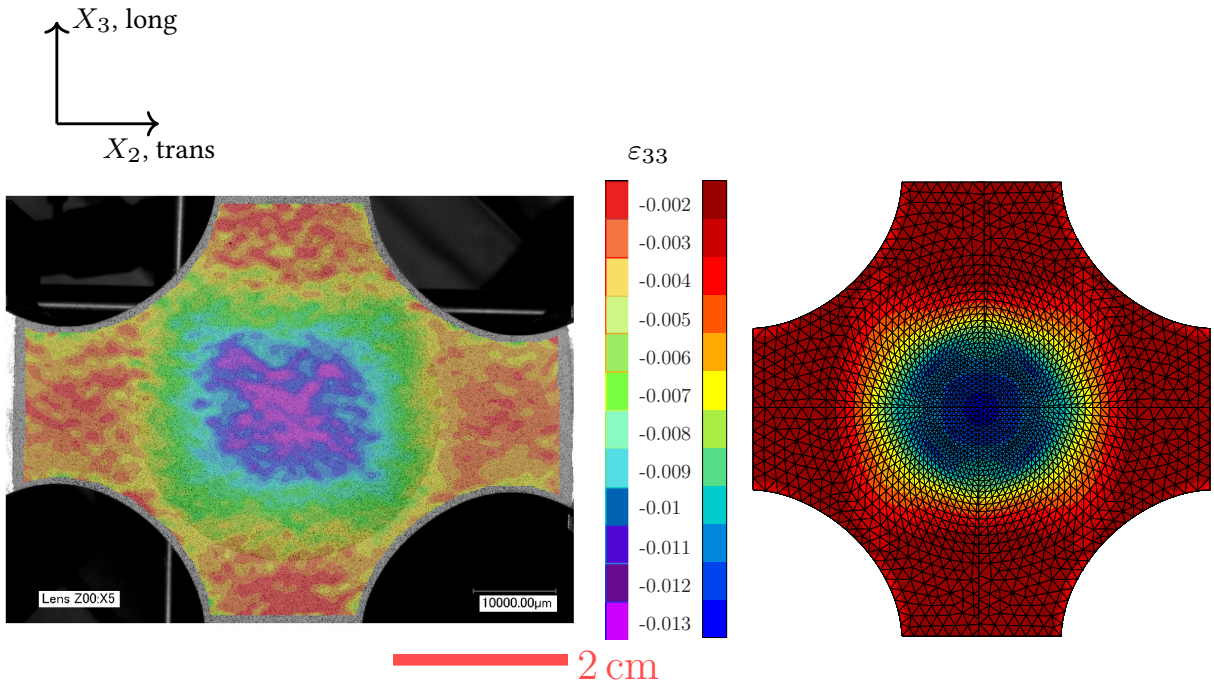


Figure 4.17 – *Champ de déformation ε_{33} pour un déplacement transverse imposé de $320\,\mu m$ (fin de la boucle en traction) et une charge longitudinale nulle.*

Pour la mesure faite au centre de l'éprouvette (Fig. 4.18), on observe une très bonne prédiction du modèle. A la première traction, une localisation de la déformation transverse, supposée être causée par la présence d'un grain « mou » sur la figure 4.16, est à nouveau mise en évidence. On obtient une déformation ε_{22} de $1{,}62\,\%$ sur la mesure contre $1{,}48\,\%$ pour le modèle. Visiblement, ce phénomène s'estompe pour les trajets suivants (avec un rapport de biaxialité non nul). En cause sans doute, le gradient de déformation, induit par la structure, qui se décentre pour devenir maximal au niveau des bords de la zone évidée (voir la figure 4.3). Le grain central est donc moins sollicité que ses voisins lors des deuxième et troisième boucles de chargement.

La deuxième mesure (Fig. 4.19) concerne un point légèrement décentré mais toujours dans la zone d'épaisseur minimale ($1{,}5\,mm$). Sur le calcul par éléments finis, une seule valeur est disponible en raison des symétries considérées, alors que la mesure expérimentale donne 4 points situés à $45°$ par rapport à l'axe horizontal. Nous pouvons ainsi quantifier l'hétérogénéité du champ et la variabilité induite par la texture cristallographique. Les points expérimentaux restent globalement proches sauf pour le quart situé en haut à gauche où on observe une déformation plus faible sur la composante ε_{33}. Cela peut être la conséquence d'une désorientation primaire non négligeable de ce grain, générant un comportement longitudinal particulier par rapport aux autres grains. Pour la composante ε_{22}, on remarque des valeurs légèrement plus importantes pour le côté gauche (points vert et violet), ce qui est également observé sur la cartographie de la figure 4.16.

La troisième mesure (Fig. 4.20) montre une dispersion plus prononcée des 4 valeurs expérimentales. L'écart entre la prévision du modèle et la mesure expérimentale sur la composante transverse peut atteindre $30\,\%$ sur les quarts « haut gauche » et « bas droit ». Cette fluctuation de la mesure est encore plus nette sur la composante 33 de la déformation, même si dans

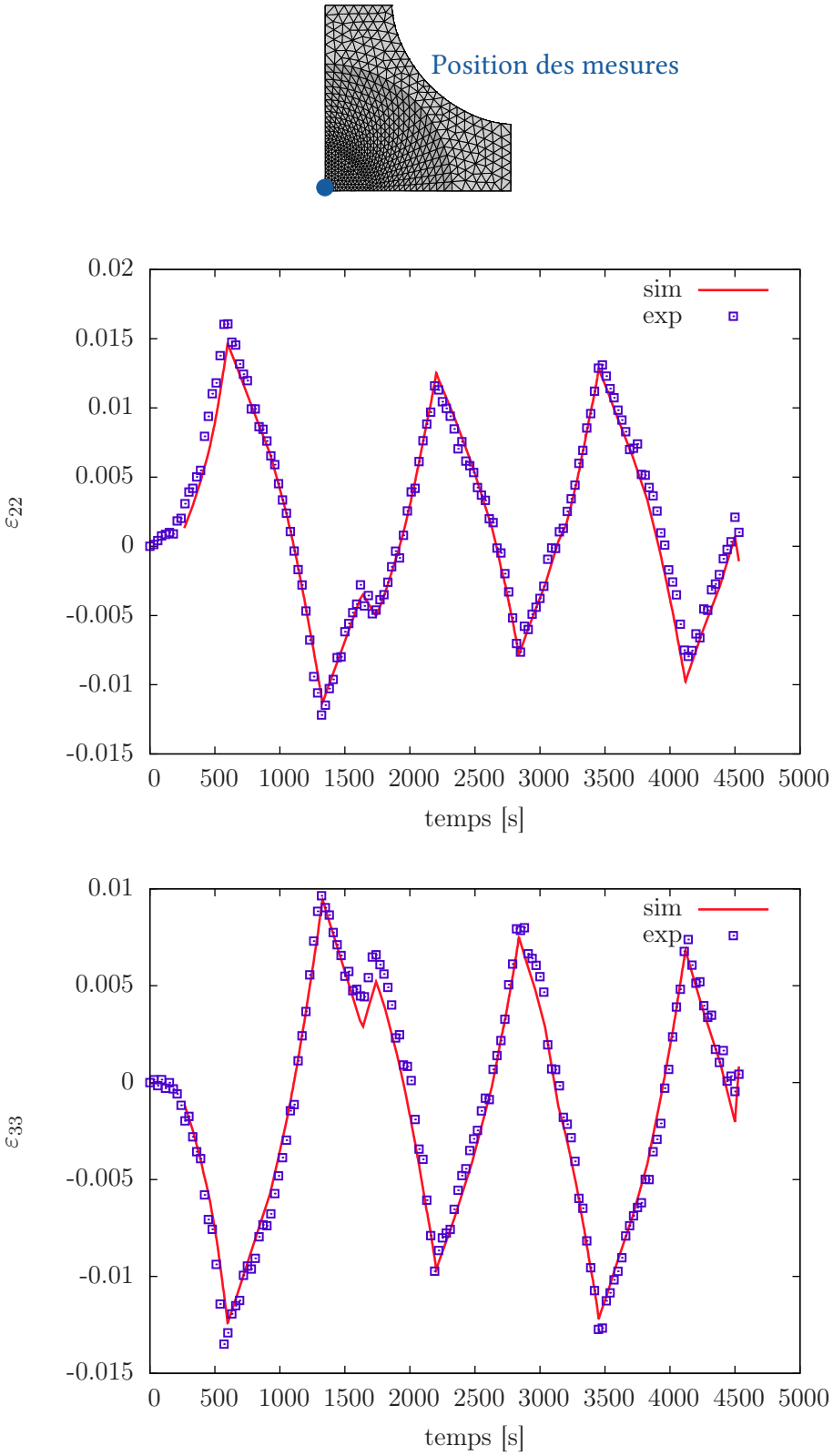


Figure 4.18 – *Comparaison entre la simulation numérique et les mesures effectuées au centre de la zone évidée, (a) pour la composante longitudinale, et (b) pour la composante transverse du tenseur des déformations.*

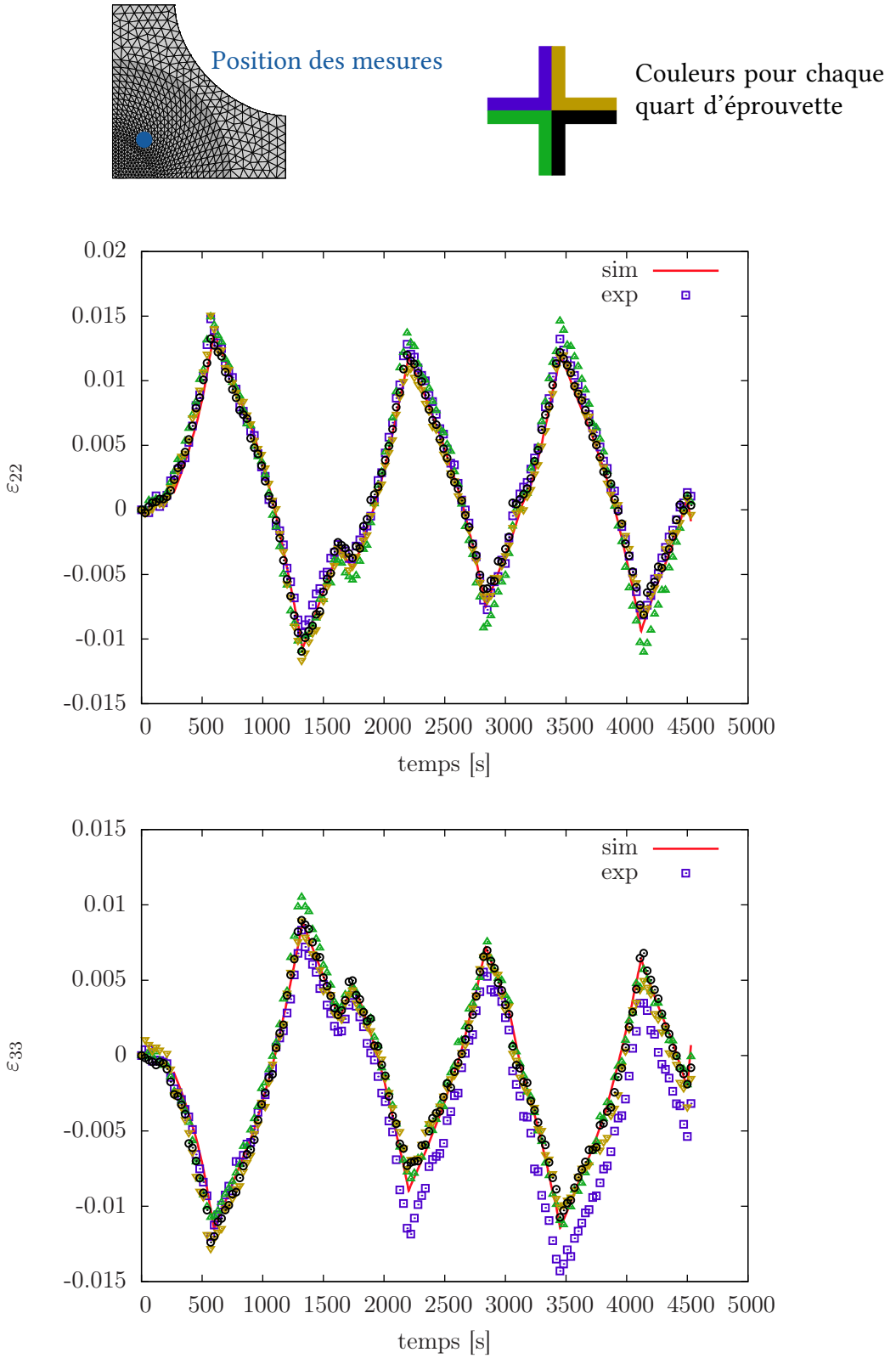


Figure 4.19 – *Comparaison entre la simulation numérique et les mesures effectuées légèrement éloignées du centre de l'éprouvette, (a) pour la composante longitudinale, et (b) pour la composante transverse du tenseur des déformations.*

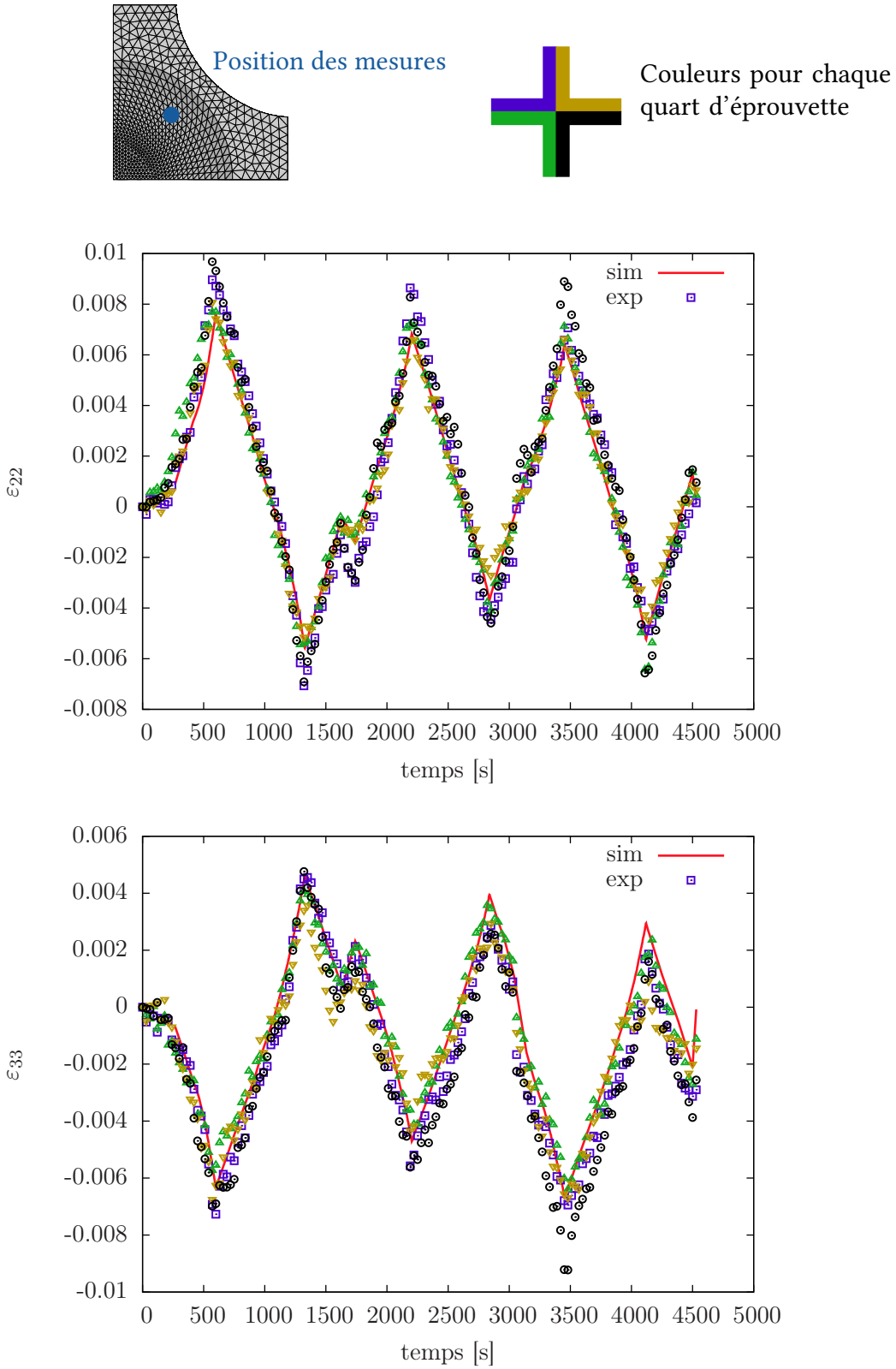


Figure 4.20 – *Comparaison entre la simulation numérique et les mesures effectuées sur le bord de la zone évidée de l'éprouvette, (a) pour la composante longitudinale, et (b) pour la composante transverse du tenseur des déformations.*

certains cas, la valeur est proche de l'incertitude pour discuter des résultats. Ceci indique que la déformation est largement perturbée dans cette zone par la microstructure particulière du matériau. En supposant des grains extrudés dans la direction longitudinale, on peut créer des joints de grains débouchant, ce qui introduit une singularité « épine ». Cette interruption du grain, avec une géométrie acérée, peut être le siège d'une localisation forte du champ de déformation.

En résumé, la réponse macroscopique fournie par le modèle est en très bon accord avec les différentes mesures, ponctuelles ou globales, réalisées. Toutefois, des localisations du champ de déformation ont pu être observées expérimentalement. Ce phénomène est relié à la microstructure particulière du matériau. Les grains, de taille millimétrique, induisent une hétérogénéité du champ qui dépend directement de l'orientation cristallographique, voire du voisinage. Cette information n'est bien sûr pas présente dans la réponse macroscopique du modèle en β. Cependant, celui-ci fournit également, par sa construction multi-échelle, une donnée plus locale : une réponse moyenne pour chaque phase cristallographique en chaque position de la structure. On peut alors fournir un encadrement de la déformation en chaque position, résultat d'une hétérogénéité cristallographique du matériau (voir la figure 4.21). Les champs de contraintes locales ne vérifient pas la condition d'équilibre sur la structure et ne peuvent donc pas prétendre représenter une solution réelle, mais ils apportent néanmoins une information complémentaire par rapport à la solution macroscopique.

Sur les courbes de la figure 4.21 représentant la réponse dans la direction transverse, les variables locales permettent d'encadrer convenablement les points expérimentaux, c'est-à-dire que les dispersions expérimentales sont du même ordre que les fluctuations de la réponse mécanique prédite pour chaque phase cristallographique. Se baser sur ces quantités locales serait sans doute bénéfique pour prédire la durée de vie de la structure, même si l'encadrement fourni reste inclus dans les bornes réelle de la déformation au sein d'une pièce. Néanmoins, l'hypothèse de « DS parfait » ne permet pas d'appréhender les écarts obtenus dans la direction longitudinale (Fig. 4.21). Il faudrait vérifier ce que donnerait le modèle en introduisant une désorientation primaire cristallographique et géométrique. Néanmoins, le temps de calcul serait largement augmenté. Dans la configuration actuelle, il est de $204\,\mathrm{h}$ sur une machine équipée de deux processeurs « Xeon Quad Core 5500 » cadencés à $2{,}66\,\mathrm{GHz}$ avec une intégration de la loi de comportement parallélisée en 8 tâches (multi-threading).

Mesures de champ sur les images « Micro »

Cette partie est consacrée aux observations plus locales du matériau, effectuées sur l'autre face de l'éprouvette et centrées sur un joint de grains. Nous rappelons que la fenêtre d'observation est de $3\,\mathrm{mm}\times3\,\mathrm{mm}$. L'idée est de mesurer un champ de déformation local dans la zone d'intérêt pour les trajets de chargement détaillés dans la partie précédente. A ce niveau de grossissement, la corrélation d'images est basée sur le mouchetis naturel obtenu par une préparation de la surface de l'éprouvette (polissage jusqu'à $1\,\mu\mathrm{m}$ suivi d'une attaque chimique à l'eau régale durant $3\,\mathrm{min}$). Sur le microscope Keyence VHX1000 équipé d'un objectif Z50 (grossissement $\times50$), on discerne des bras de dendrites secondaires (en coupe) et les hétérogénéités chimiques liées à la présence de carbures ou borures. La zone d'intérêt est découpée en fenêtres de 34×34 pixels. Le pas de recouvrement est pris égal à 6 pixels. L'incertitude maximale sur les déplacements obtenus est encore imposée avec une valeur maximale tolérée de $0{,}02$ pixel. La figure 4.22 illustre la segmentation régulière de la fenêtre d'intérêt. Nous présentons également sur la figure 4.22, le champ de déformation pour la composante axiale à

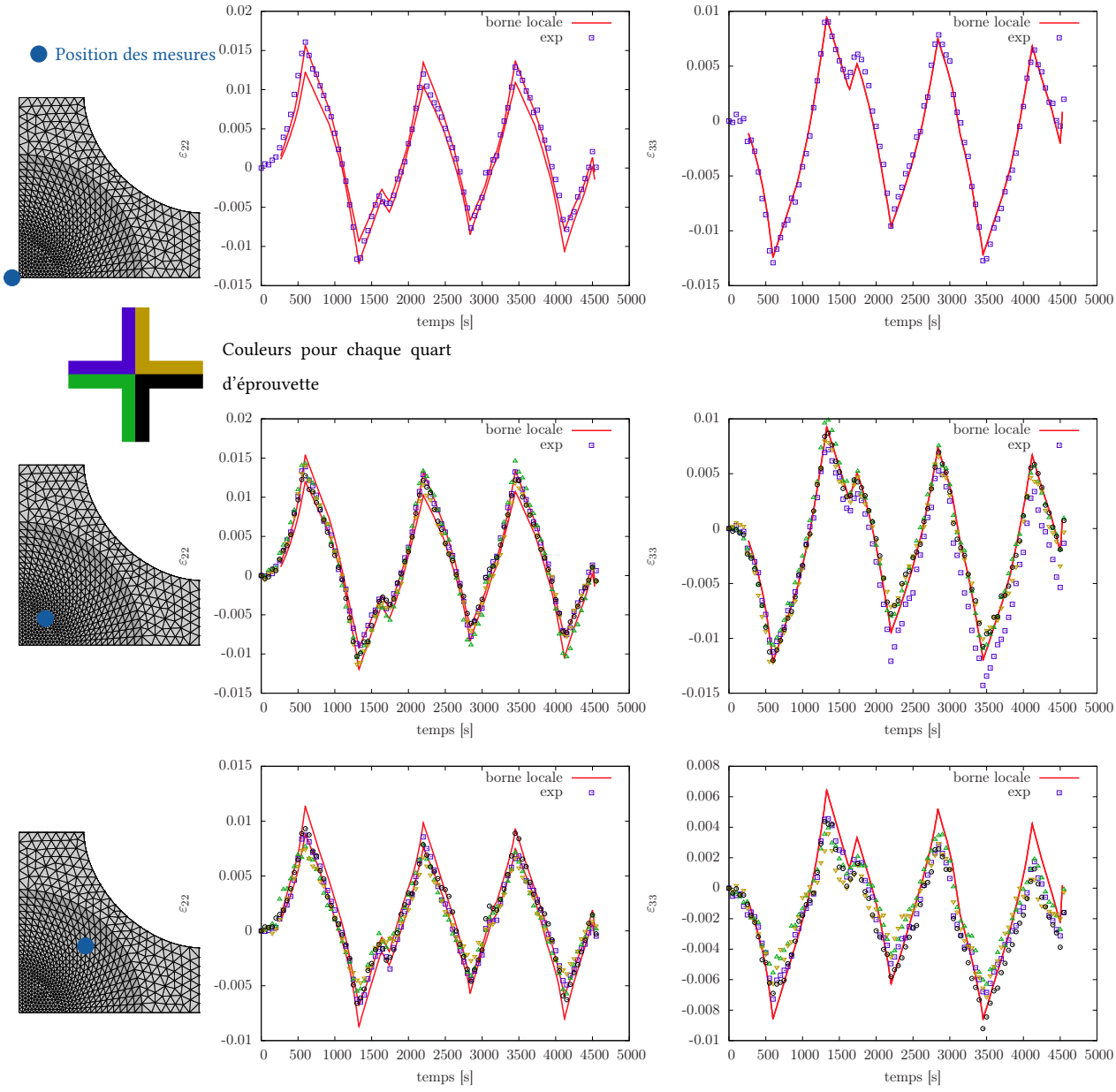


Figure 4.21 – *Différents points de mesure pour la composante longitudinale et transverse du tenseur des déformations sur les mesures par corrélation d'images et les valeurs maximale et minimale fournies par les variables locales du modèle en β.*

l'instant où l'effort de traction est maximal (première boucle de chargement).

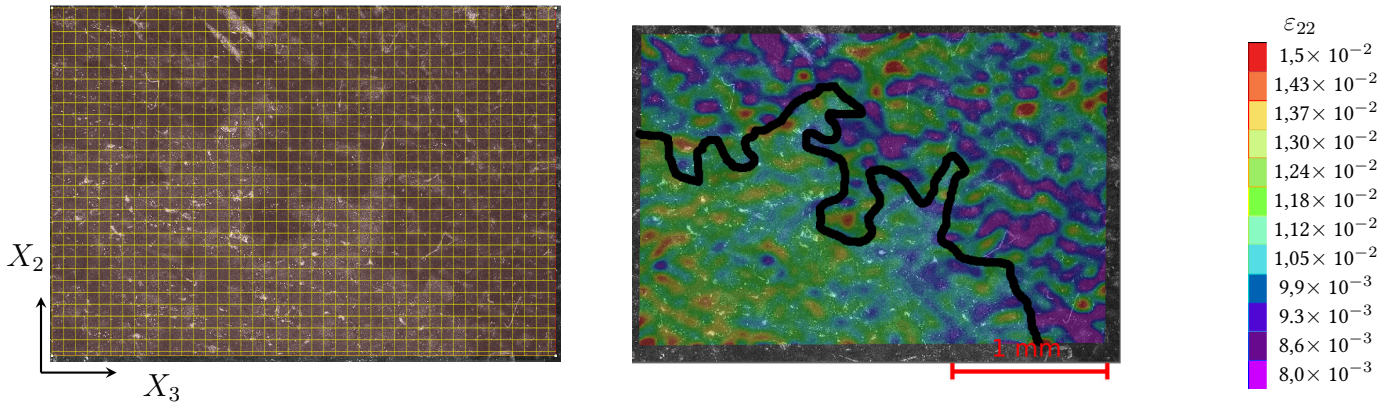


Figure 4.22 – *Découpage de la zone d'intérêt en fenêtres de* 34×34 *pixels (pas de recouvrement :* 6 *pixels) et mesure du champ de déformation transverse* ε_{22} *à l'instant de traction maximale pour la première boucle de chargement.*

Afin d'améliorer les analyses, la courbe noire qui est ajoutée matérialise le joint de grains tel qu'il est discerné sur les images brutes. Premièrement, le champ de déformation semble être différent en moyenne de part et d'autre du joint. Le grain situé en haut de l'image se déforme visiblement moins que celui de la partie basse. Cela provient de l'anisotropie du comportement élastoplastique, qui dépend de l'orientation cristallographique. Toutefois, le champ reste très bruité au sein des deux grains. Nous sommes tentés de penser que l'hétérogénéité du matériau à cette échelle induit ces fluctuations locales. A certains endroits, le champ de déformation semble suivre la forme du réseau « dendrites/zones inter-dendritiques ». De précédents travaux ont montré une différence de comportement pour ces deux phases en fluage à haute température [Texier et al., 2014]. Sur des observations *post mortem*, les auteurs observent une rugosité en surface dont l'évolution spatiale se corrèle avec le passage de zones dendritiques (pics) vers des zones inter-dendritiques (vallées). Les zones inter-dendritiques semblent plus ductiles, ce que les auteurs expliquent par des canaux de γ plus larges et des précipités γ' avec des formes grossières.

La procédure expérimentale mise en œuvre ne permet pas d'observer de localisation préférentielle de la déformation sur les dentelures du joint de grains. Il peut s'agir :

- d'un manque de résolution sur la corrélation d'images. Cela est surtout dû à la caméra CCD utilisée, qui ne possède que 2 méga pixels et qui limite donc la taille des fenêtres ;
- d'un contraste de comportement mécanique entre les dendrites et la zone inter-dendritique trop élevé à température ambiante qui masque les autres sources de localisation de la déformation.

D'autres auteurs ont observés ces dentelures aux joints de grains. Par exemple, des analyses EBSD sur des bicristaux en GTD 444 et René N4 (superalliages base nickel) sollicités en fluage à haute température (982 °C) montrent une rotation du réseau cristallin à proximité des dentelures du joint [Stinville et al., 2015]. L'échelle d'observation est proche de celle que nous utilisons ici. Toutefois, la déformation plastique est bien plus élevée (2 % et 5 %) dans cette étude [Stinville et al., 2015] que sur notre essai (inférieure à 1 %). Pour le moment, nous conservons

l'hypothèse d'un faible impact de la morphologie des joints de grains sur la réponse mécanique. Dans [Dunne et al., 2007], le calcul en champ complet, sur une microstructure réelle obtenue par une analyse EBSD d'un superalliage base nickel DS (MarM-002), montre une bonne prédiction de la zone critique par rapport à l'expérience sur un essai de flexion « trois points » cyclique à température ambiante, sollicitant les grains en transverse. Sur cet essai, l'activité plastique est localisée sur certains joints de grains mais le champ de déformation ne montre pas d'effet de la tortuosité.

CHAPITRE 5

Vers l'analyse des réponses mécaniques de structures oligogranulaires

Sommaire

5.1 Modélisation d'une structure tridimensionnelle en champ complet . 154

5.2 Utilisation des variables locales d'un modèle en champ moyen 166

Ce dernier chapitre ouvre la discussion sur le dimensionnement de structures possédant des singularités et/ou hétérogénéités macroscopiques générant une dispersion sur les réponses mécaniques et les performances (déformation maximale, durée de vie, ...) dont il est crucial d'évaluer les bornes maximale et minimale. En particulier, nous traitons le cas de structures tridimensionnelles complexes (éprouvette cruciforme, aube, ...) fabriquées avec un matériau constitué de gros grains dont la répartition spatiale et l'orientation cristallographique sont inconnues. C'est le cas des pièces fabriquées en DS200+Hf. Le terme « oligogranulaire » trouve alors tout son sens puisqu'un nombre limité de grains est présent dans la pièce. En présence d'un gradient supplémentaire des contraintes issu de la géométrie et/ou thermique, l'utilisation d'un modèle homogène équivalent est $a\ priori$ inadaptée. Et pour cause, la séparabilité des échelles requise pour définir un tel milieu n'est pas assurée. L'information statistique sur la texture cristallographique n'est pas entièrement représentée dans un sous-domaine d pris largement plus petit que la taille de la structure l, voire le VER possède des dimensions plus grandes que la structure.

Dans le chapitre 4, nous avons vu que le modèle en β (avec ses variables macroscopiques) fournit de bonnes prévisions sur les déformations globales et même ponctuelles prises au sein de la zone évidée de l'éprouvette cruciforme testée en traction biaxiale. Cependant, ce modèle ne permet pas de prévoir les zones de localisation, induites par une morphologie aigüe des joints de grains et/ou l'incompatibilité entre deux orientations cristallographiques voisines, qui sont autant de points faibles pour la pièce. Dans ce sens, nous avons montré que l'approche micromécanique propose également des estimations locales par phase cristallographique en chaque position de la structure, qui peuvent servir de bornes à l'ordre 1 de la réponse mécanique du milieu hétérogène étudié. En particulier, nous avons constaté que ces estimations maximales et minimales encadrent convenablement les valeurs ponctuelles mesurées expérimentalement sur l'éprouvette en croix dans la fin du chapitre 4. Si le fait de construire des modèles d'amorçage ou de durée de vie uniquement sur la donnée globale peut entraîner une surestimation de la tenue de la pièce (on sous-estime la réponse), l'utilisation de cet encadrement constitue une première solution pour réduire les incertitudes sur la durée de vie.

Néanmoins, cela ne résout pas la problématique précédente : le sous-domaine d'étude d, petit devant la structure l, ne contient qu'un ou deux grains. La réponse mécanique réelle dans ce sous volume d doit être largement différente des estimations par phase cristallographique du modèle à champ moyen, qui suppose que le grain est noyé dans un MHE. Premièrement, il faut déterminer la distance entre les bornes estimées par l'approche micromécanique et les valeurs

réelles possibles. On peut se douter que les mesures expérimentales locales n'ont pas la résolution spatiale suffisante, qui dépend directement de la taille des fenêtres de corrélation, pour illustrer la forte localisation des variables mécaniques à proximité des joints. Pour répondre à cette question, la seule solution restante est une série de calculs par « force brute » en maillant ce niveau d'hétérogénéités au sein de la géométrie : on réalise des calculs « en champ complet » sur une structure. Une première partie s'intéresse à la procédure de génération de ces maillages. Nous illustrerons la variabilité de la réponse observée sur une éprouvette cruciforme contenant une texture synthétique. Dans ce cas, le résultat du calcul obtenu représente la solution d'une pièce virtuelle définie par la combinaison d'une géométrie et d'une microstructure. Le problème introduit une partie aléatoire dans la solution dont on peut évaluer la dispersion générée sur chaque variable mécanique en chaque point géométrique. Finalement, la modélisation d'une structure oligocristalline par ce biais se résume à la construction d'une base de données constituée d'un grand nombre de réalisations numériques pour une même géométrie et différentes morphologies des grains et jeux d'orientations cristallographiques.

Une nouvelle base doit être construite pour chaque type de sollicitations appliquées sur la structure (régimes du moteur lors d'une mission type, procédures d'urgence, ...). Cette solution n'est pas réaliste dans un contexte industriel, en particulier lors des étapes de dimensionnement où la mise en données (la géométrie, le chargement) varie. La seconde partie propose alors de regarder les données locales fournies par les approches à champ moyen, dont la précision a pu être illustrée dans le chapitre 4, pour construire une estimation de la dispersion à partir d'un seul calcul complet.

5.1 Modélisation d'une structure tridimensionnelle en champ complet

Cette partie détaille la mise en place d'un calcul en champ complet sur une structure DS. Afin de pouvoir construire une base de données représentative (c'est-à-dire un grand nombre de calculs en champ complet), la génération des « pièces virtuelles » doit être automatisée. C'est à ce point que s'intéresse notre premier paragraphe. Puis nous concentrerons notre étude sur un essai biaxial qui illustrera la variabilité de la réponse mécanique qu'il est possible d'obtenir en fonction de la microstructure. Toutefois, il est important de mentionner que la procédure a été utilisée également sur une géométrie réelle d'aube de turbine en DS200+Hf (fournie par Safran Aircraft Engine, Gennevilliers) et qu'une étude sur l'effet de la désorientation primaire sur une aube soumise à des chargements réalistes (missions types) est en cours à SafranTech [Gourdin, 2016].

5.1.1 Mise en données

Géométrie hétérogène

Plusieurs idées ont été testées afin d'introduire la texture cristallographique au sein d'une géométrie de pièce donnée. Une première consiste à réaliser les opérations au cours de l'étape de design (CAD), alors que l'autre travaille sur un maillage grossier de celle-ci. De prime abord, la seconde solution possède l'avantage de travailler sur une « peau » de la géométrie parfaitement définie : ce sont les éléments décrits par des nœuds, reliés entre eux par des segments de droite et dont les coordonnées spatiales sont connues. On peut alors choisir un langage de programmation quelconque pour réaliser les modifications. En particulier, l'opération à re-

produire un grand nombre de fois est le remaillage local à l'intersection entre une droite (le joint de grains) et les triangles de la peau proche de cette zone afin de conserver la conformité. L'algorithme définit de nouveaux nœuds sur le joint de grains et remodèle les triangles à proximité. Une fois que plusieurs droites définissent un contour fermé (un grain), le groupe d'éléments est nommé. Avec l'aide de **V. Chiaruttini** , des résultats ont été obtenus avec le code Zset et les algorithmes de remaillage de l'INRIA (en particulier la fonction de découpage *cut_surface*). Cette fonction a été initialement implémentée pour le remaillage local à proximité d'un front de fissure, dans le but de suivre son évolution tout en conservant la conformité du maillage [Chiaruttini et al., 2010]. Pour notre application, plusieurs problèmes ont été identifiés au moment de l'utilisation :

- le maillage final de la peau n'est pas toujours de bonne qualité, ce qui empêche dans certains cas la procédure de remplissage (avec le mailleur 3D GHS3D) permettant de générer un maillage volumique (des tétraèdres). En effet, on optimise des sous-problèmes (à chaque ajout d'un joint de grains) qui peuvent converger vers une solution avec une qualité de mailles insuffisante ;

- la procédure de découpage supprime certains traits de construction de la géométrie. Si des conditions aux limites sont imposées à l'aide de ces traits, la redéfinition de celles-ci *a posteriori* peut être ardue. Cela ne pose pas de problème sur l'étude d'une éprouvette cruciforme mais s'avère rédhibitoire pour les calculs sur l'aube (définition des pressions aérodynamiques, ...).

De plus, au moment de notre étude où nous avons utilisé cette procédure, il n'était pas possible de l'appliquer à une structure avec une géométrie complexe (aube de turbine en DS200+Hf). C'est pourquoi la solution retenue consiste à travailler en amont de la création du maillage, directement sur la description CAO. La pièce devient alors un assemblage (groupement de « Part ») généré par l'intersection entre la géométrie tridimensionnelle et une surface représentant le polycristal DS réel (EBSD) ou synthétique (Voronoï, ...). Nous utilisons le module *DesignModeler* d'*ANSYS Workbench* [Workbench manual, 2014]. Ce logiciel est également utilisé par le bureau d'étude de Safran Aircraft Engines pour la mise en données du calcul sur l'aube de turbine. On conserve ainsi une continuité du logiciel de travail. La procédure se scinde en deux étapes : (i) la définition de la géométrie des grains, écrite en langage *python* générant en sortie un javascript puis (ii) le découpage, créé par le logiciel de design, qui accepte en entrée le fichier javascript de la première étape. La figure 5.1 résume ce processus, dans le cas de l'introduction d'une texture cristallographique DS dans notre éprouvette cruciforme.

L'algorithme débute par la génération d'une microstructure synthétique (pavage de Voronoï ou autre). Deux paramètres permettent de définir le nombre de grains et les dimensions du volume. Cela permet d'imposer une taille de grains réaliste dans la structure. Le résultat est stocké dans deux tableaux, un dont chaque ligne correspond à un grain, et dont les colonnes définissent la succession de points donnant le contour fermé, l'autre où les positions de tous les coins sont répertoriés avec leurs coordonnées. Pour une microstructure synthétique, cette donnée est immédiate. Si la texture se réfère à une analyse EBSD, il est nécessaire au préalable de discrétiser le contour des grains à partir de l'image. Nous utilisons alors les outils décrits dans la partie 3.3 du chapitre 3 et développés par **N'Guyen**. La seconde partie du code est consacrée à l'écriture du javascript lisible par le module *DesignModeler*.

Après avoir chargé une géométrie, le script s'exécute dans le module d'*ANSYS Workbench*.

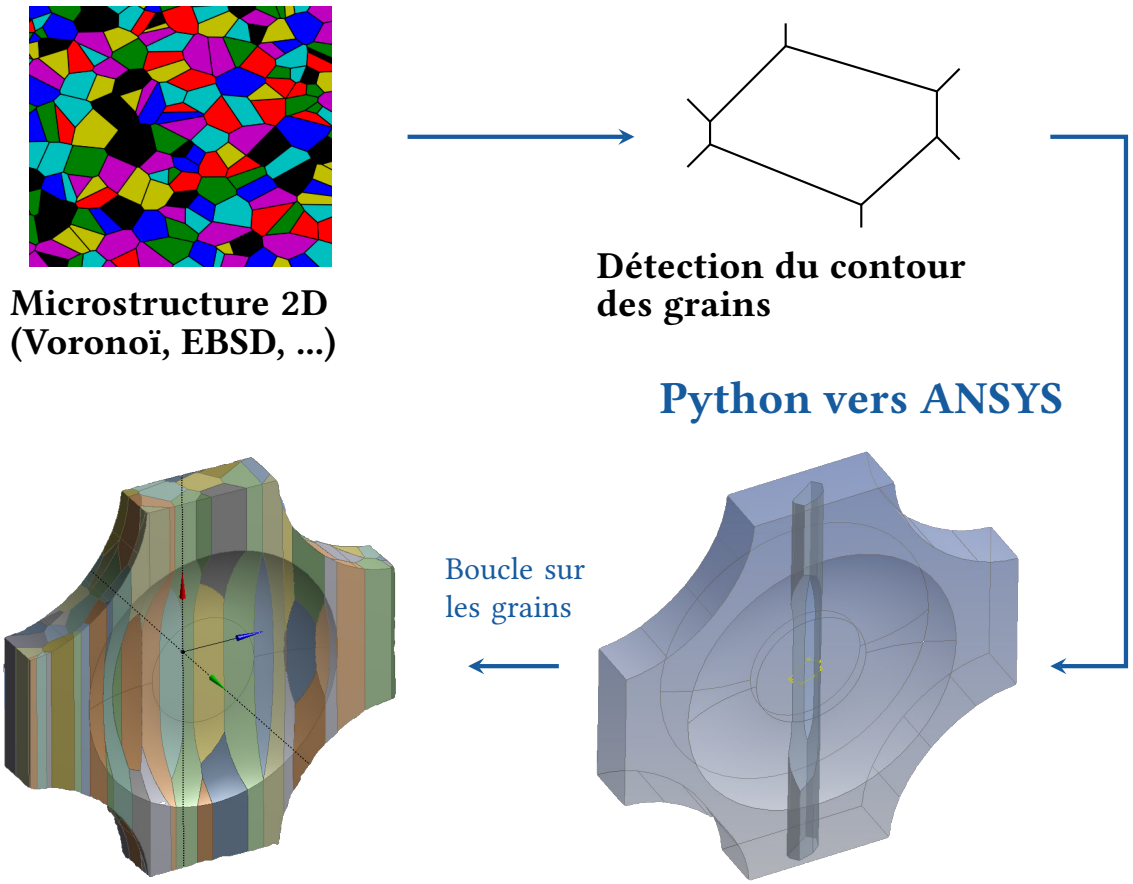


Figure 5.1 – *Chaîne d'opérations permettant d'introduire une microstructure 2D synthétique ou réaliste extrudée dans une géométrie quelconque (communication Python/ANSYS par un javascript).*

Il consiste à produire automatiquement les esquisses (qui représentent chaque grain) dans le plan transverse puis à découper successivement la géométrie selon la normale au plan d'esquisse. Pour une découpe, on obtient alors deux « ensembles » : l'intersection du grain avec la structure et le reste. Une extrusion peut générer plus de deux morceaux. Par exemple, ce phénomène s'observe sur les bords de la zone évidée de l'éprouvette cruciforme (voir la dernière étape de la figure 5.1). Si cela est souhaité, les deux morceaux d'un grain peuvent être fictivement rassemblés en leur attribuant la même orientation cristallographique (donc le même comportement mécanique). Pour finir, toutes les parties de la pièce sont rassemblées sous un seul « ensemble » afin d'assurer ensuite la conformité du maillage. Pour la plupart, les conditions aux limites antérieures à l'introduction de la microstructure ne seront plus fonctionnelles, même si les traits de construction sont conservés : les surfaces où sont appliquées le chargement n'existent plus (elles ont été coupées). Il faut donc les redéfinir, ce qui peut être contraignant lorsqu'on souhaite réaliser un nombre conséquent de pièces synthétiques différentes (géométrie + microstructure).

Maillage

La génération du maillage est réalisée avec le module *Mechanical* d'*ANSYS Workbench* pour la géométrie préalablement enrichie avec une texture cristallographique DS. La figure 5.2 illustre deux résultats de maillage obtenus pour une éprouvette cruciforme.

Pour arriver au résultat, nous utilisons les fonctions suivantes du module :

- utilisation d'éléments tétraédriques ;
- définition d'une taille maximale et minimale des éléments dans le volume total ;
- si besoin, définition d'une taille maximale différente sur toutes les faces (joints de grains).

La dernière option peut être utilisée de manière globale sur tous les joints de grains afin d'améliorer la résolution au niveau des zones propices à la localisation de la déformation. Dans d'autres cas, l'option pourra être utilisée localement là où l'algorithme de maillage échoue. Une fois le maillage réalisé, nous exportons celui-ci au format Zset (.geof). Cette étape se fait simplement depuis que le logiciel *Workbench ANSYS* a été interfacé avec Zset (développement réalisé par **F. Meunier** à Safran Tech [Meunier, 2016]). Par la suite, on pourrait très bien affiner le maillage avec les outils de l'INRIA dans Zset.

Pour finir la mise en données, il faut encore assigner à chaque élément d'un groupe (elset) une orientation cristallographique. Pour la suite, nous conservons l'hypothèse précédente d'un DS « parfait » : les grains sont extrudés selon l'axe X_3 (pas de désorientation géométrique) et l'orientation cristallographique revient à assigner une valeur pour l'angle d'**Euler** $\phi_1 \in [0\,^\circ,90\,^\circ[$ modulo $3\,^\circ$ (pas de désorientation cristallographique primaire).

5.1.2 Variabilité de la réponse mécanique : cas d'une traction biaxiale

Dans ce chapitre, nous proposons d'étudier une traction biaxiale proportionnelle avec le même déplacement imposé en direction longitudinale et en direction transverse. Deux types de modélisation sont menés (Fig. 5.3) : (i) un calcul sur un maillage uniforme dans lequel la règle en β est appliquée à chaque point de Gauss (30 phases cristallographiques avec une

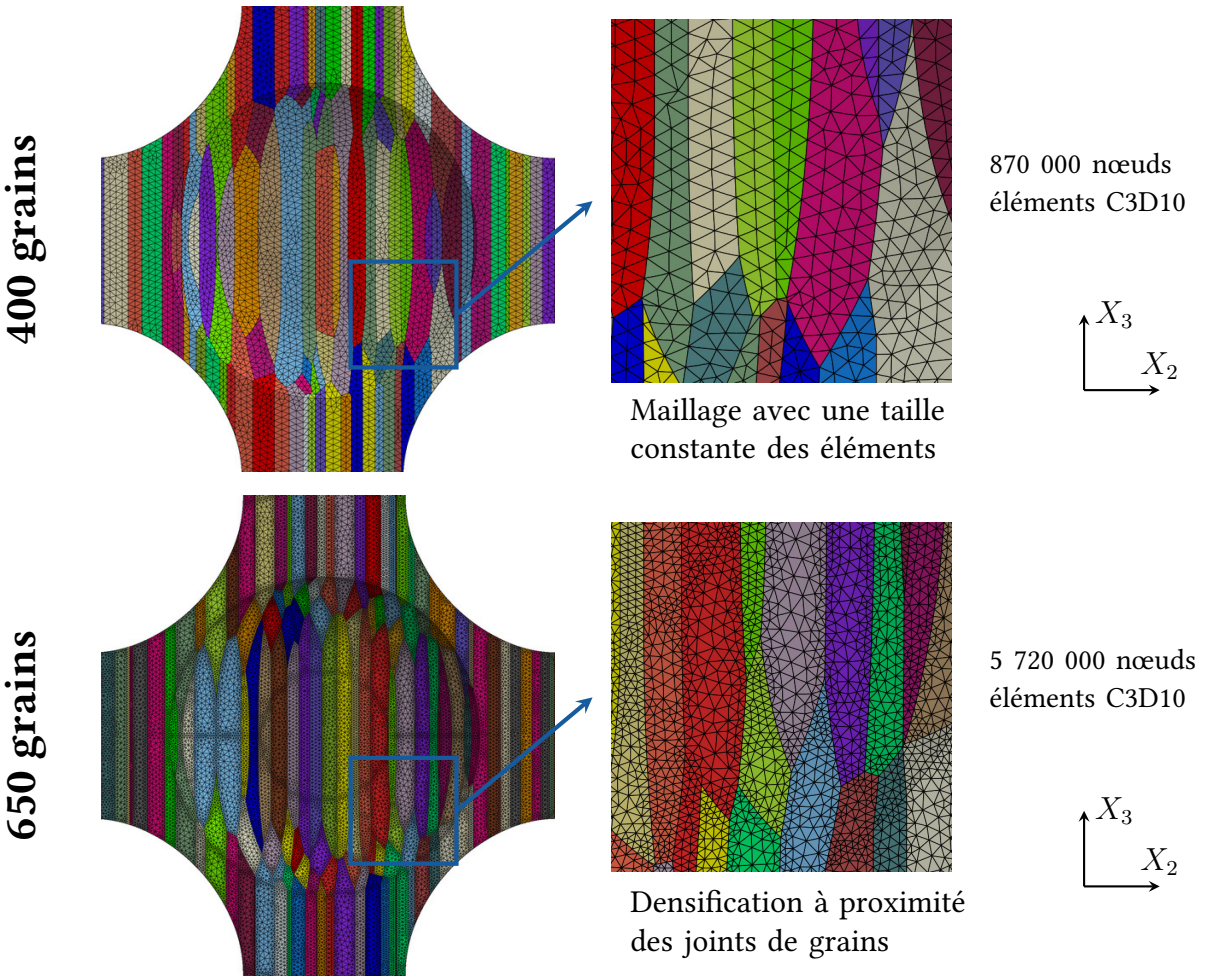
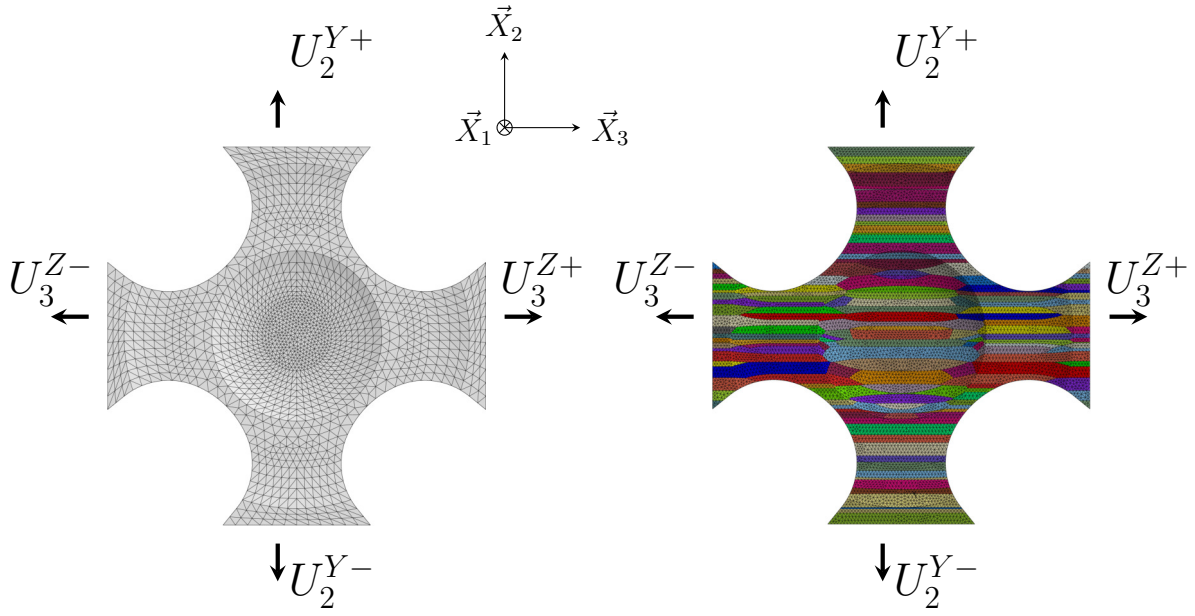


Figure 5.2 – *Exemple de deux maillages obtenus avec le module* Mechanical *d'*ANSYS Workbench *pour deux tailles de grains et dans le second cas, une densité plus forte des éléments à proximité des joints de grains*

même fraction volumique) (ii) un calcul dit « CPFE » sur un maillage représentant la géométrie avec une microstructure explicite constituée de 400 grains (la taille des grains est de l'ordre de $2\,\mathrm{mm}$). Dix jeux d'orientations cristallographiques, représentant dix réalisations de pièce, sont considérés.



Règle en β sur tous les points de Gauss (27 944 éléments)

Une orientation cristallographique est assignée à chaque point de Gauss (614 730 éléments)

Figure 5.3 – *Deux niveaux de calcul menés sur une éprouvette cruciforme avec des conditions aux limites sur les déplacements longitudinaux et transverses ($U_2^{Y\pm} = U_3^{Z\pm}$).*

Pour le calcul CPFE, nous utilisons le solveur parallèle disponible dans le code de calcul *Zset*. Nous travaillons sur 8 sous-domaines, qui sont générés au moyen du module de découpage *Metis*. La méthode cherche à éliminer les cas où la frontière entre domaines coïncide avec les joints de grains. Le solveur linéaire cherchant à annuler les différences aux frontières entre sous-domaines, cela est d'autant plus aisé que la zone est homogène. Sur chaque sous-domaine, la loi de comportement de type **Méric** et **Cailletaud** (présenté au chapitre 1) est intégrée en utilisant 4 *threads*. Une telle mise en données permet de résoudre le problème, qui contient environ $2\,640\,000$ degrés de liberté avec en moyenne 229 incréments de temps (420 itérations) et un temps CPU de $136{,}5\,\mathrm{h}$ sur des processeurs AMD Opteron 6128 à $2\,\mathrm{GHz}$. Toutefois, alors même que tous les calculs utilisent la même morphologie de grains, nous avons remarqué des fluctuations très grandes dans la facilité à résoudre le problème mécanique. Certaines zones subissent en effet un chargement très important (en particulier les grains débouchants avec une forme acérée). A cela peut s'ajouter la faible qualité des éléments au niveau de la singularité « épine ». On observe alors en ces points des valeurs trop importantes voire n'ayant pas de sens physique, et qui ralentissent la convergence du calcul. Ainsi l'un des calculs a duré près de $320\,\mathrm{h}$ et a nécessité 852 incréments (1221 itérations).

Le chargement étudié est une traction biaxiale monotone avec une même amplitude imposée sur les deux directions de déplacement, égale à $480\,\mu\mathrm{m}$, ce qui représente un chargement plus important que lors des essais expérimentaux (cf le chapitre 4), surtout qu'on sollicite de ma-

nière équivalente les deux axes de chargement. Ceci permet d'éprouver les modèles pour des non linéarités du comportement plus élevées. La figure 5.4 illustre la réponse macroscopique du modèle en β pour les composantes longitudinale et transverse du tenseur des contraintes (Σ_{33}, Σ_{22}) et des déformations (E_{33}, E_{22}) en fin de chargement.

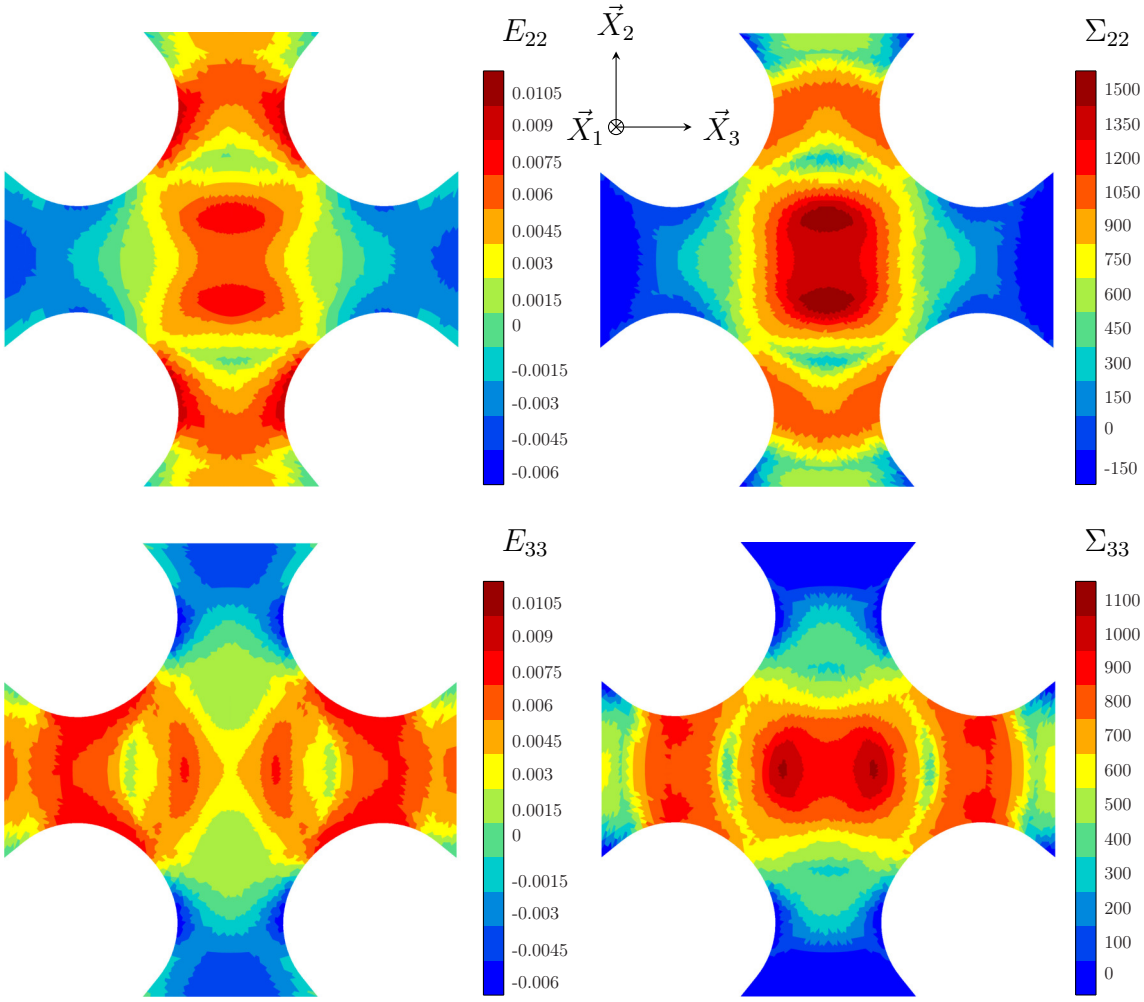


Figure 5.4 – *Cartes des champs de déformation E_{22}, E_{33} et de contrainte Σ_{22}, Σ_{33} macroscopiques issus d'un calcul uniforme avec la règle en β pour une traction biaxiale de rapport 1 entre les déplacements longitudinal et transverse, et de valeur $400\,\mu m$ (l'axe des grains est $\vec{X}_3$.*

Travailler à l'interface entre deux échelles impose de bien différencier les variables se référant à chaque niveau de description. Pour la suite, nous parlons de variables macroscopiques pour celles qui informent sur une réponse moyenne du matériau (à l'échelle d'un volume élémentaire en DS200+Hf). Cette donnée sera essentiellement issue d'une modélisation sur un maillage homogène. Nous notons $\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}$ le tenseur des déformations globales et $\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}$ le tenseur des contraintes globales. Nous les différencions des variables à l'échelle du grain, notées $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}$ et $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}$ pour le tenseur des déformations, respectivement des contraintes. Ces dernières sont exprimés également dans le repère global mais introduise un niveau de description supplémentaire explicite pour le calcul en champ complet ou implicite si on étudie les réponses par phase cristallographique d'un modèle à champ moyen. Nous montrons 4 champs réponses pour les déformations longitudinale (Fig. 5.7) et transverse (Fig. 5.5) ainsi que pour la contrainte lon-

gitudinale (Fig. 5.6) issus de différentes textures cristallographiques (seul le jeu d'orientations est modifié).

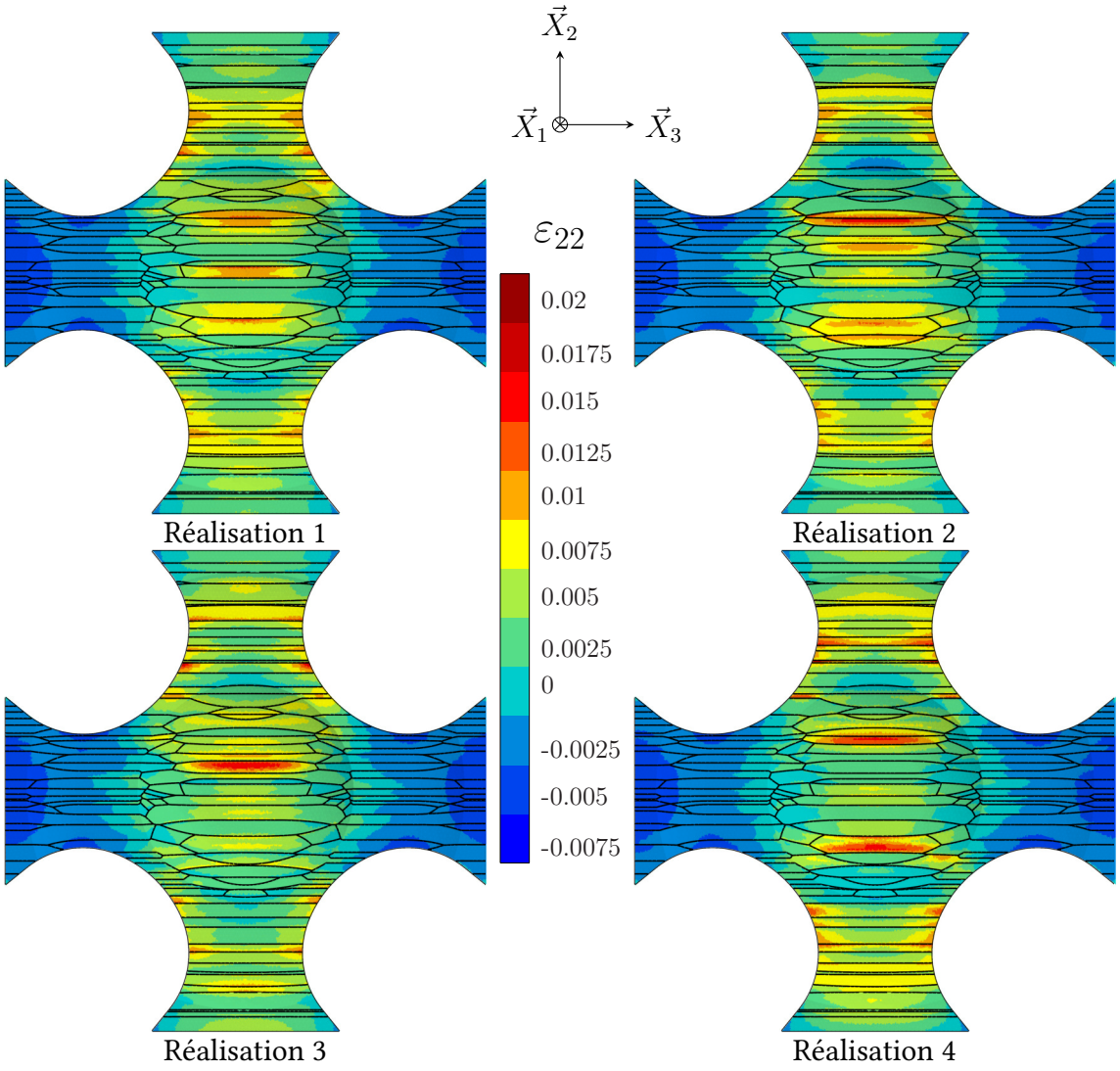


Figure 5.5 – *Cartes des déformations transverses ε_{22} pour une modélisation en champ complet utilisant la même morphologie et position des grains et 4 jeux différents d'orientations cristallographiques.*

Nous observons sur la figure 5.5, que la déformation dans la direction transverse est très dépendante de la microstructure. Les zones de concentration ne sont pas situées aux mêmes positions sur les quatre cartographies. Les valeurs maximales sont également plus élevées que pour les données macroscopiques fournies par le modèle (il y a un facteur 2 sur l'échelle). Comme pour l'étude menée sur le VER dans le chapitre 3, on remarque des fluctuations bien plus faibles dans la direction longitudinale, en particulier pour la déformation E_{33} (Fig. 5.7) où la variation du champ dépend essentiellement de la géométrie de la structure. Pour la contrainte Σ_{33} (Fig. 5.6), on distingue de légères fluctuations dans la zone utile. Nous avions vu, lors des comparaisons par phase cristallographique sur le VER, que la contrainte longitudinale devenait hétérogène dans le régime plastique. C'est pourquoi, les seules dispersions qui sont observées entre les réalisations se situent dans la zone utile ou à proximité, et uniquement au sein de grains ayant

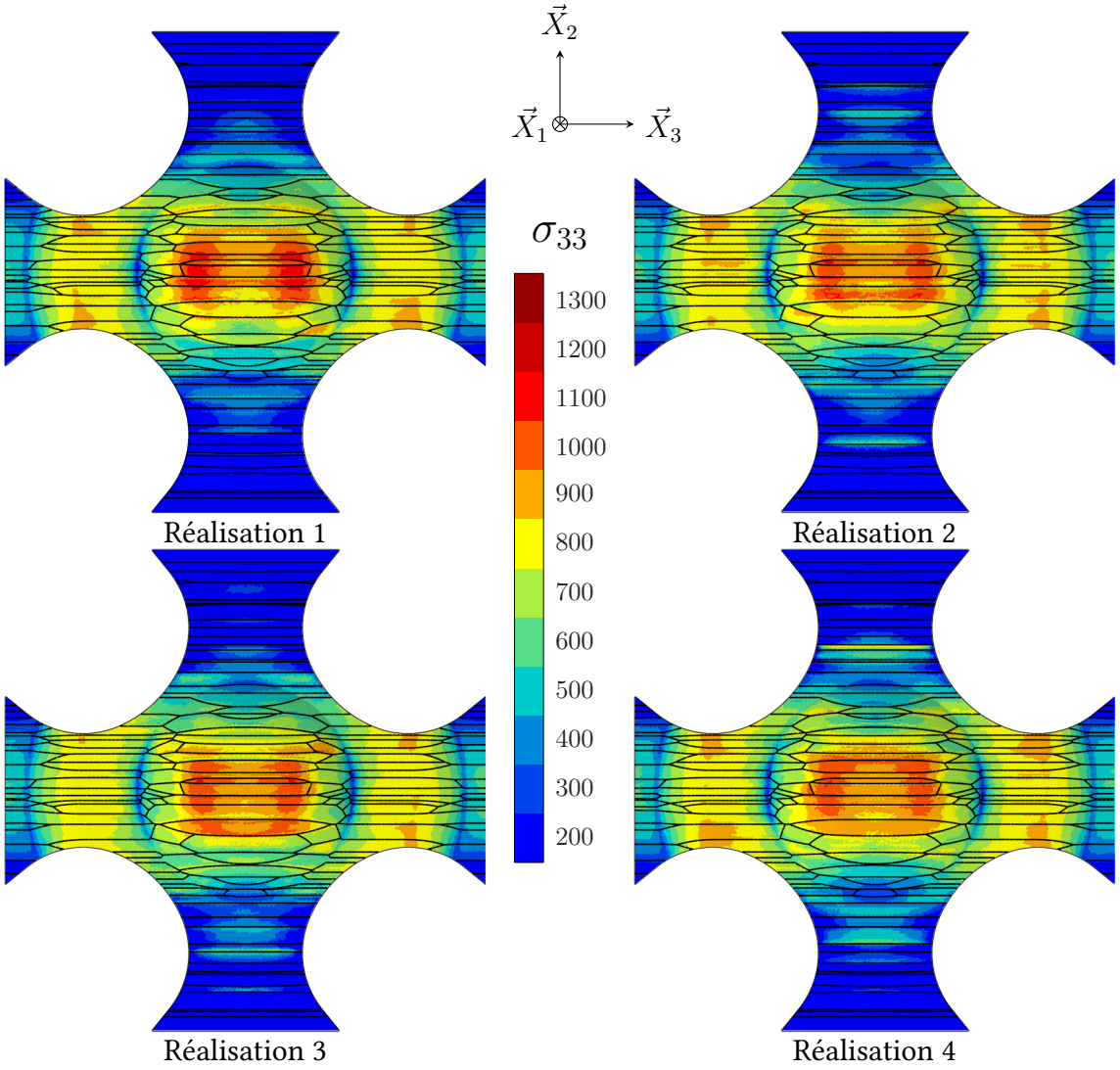


Figure 5.6 – *Cartes des contraintes longitudinales σ_{33} pour une modélisation en champ complet utilisant la même morphologie et position des grains et 4 jeux différents d'orientations cristallographiques.*

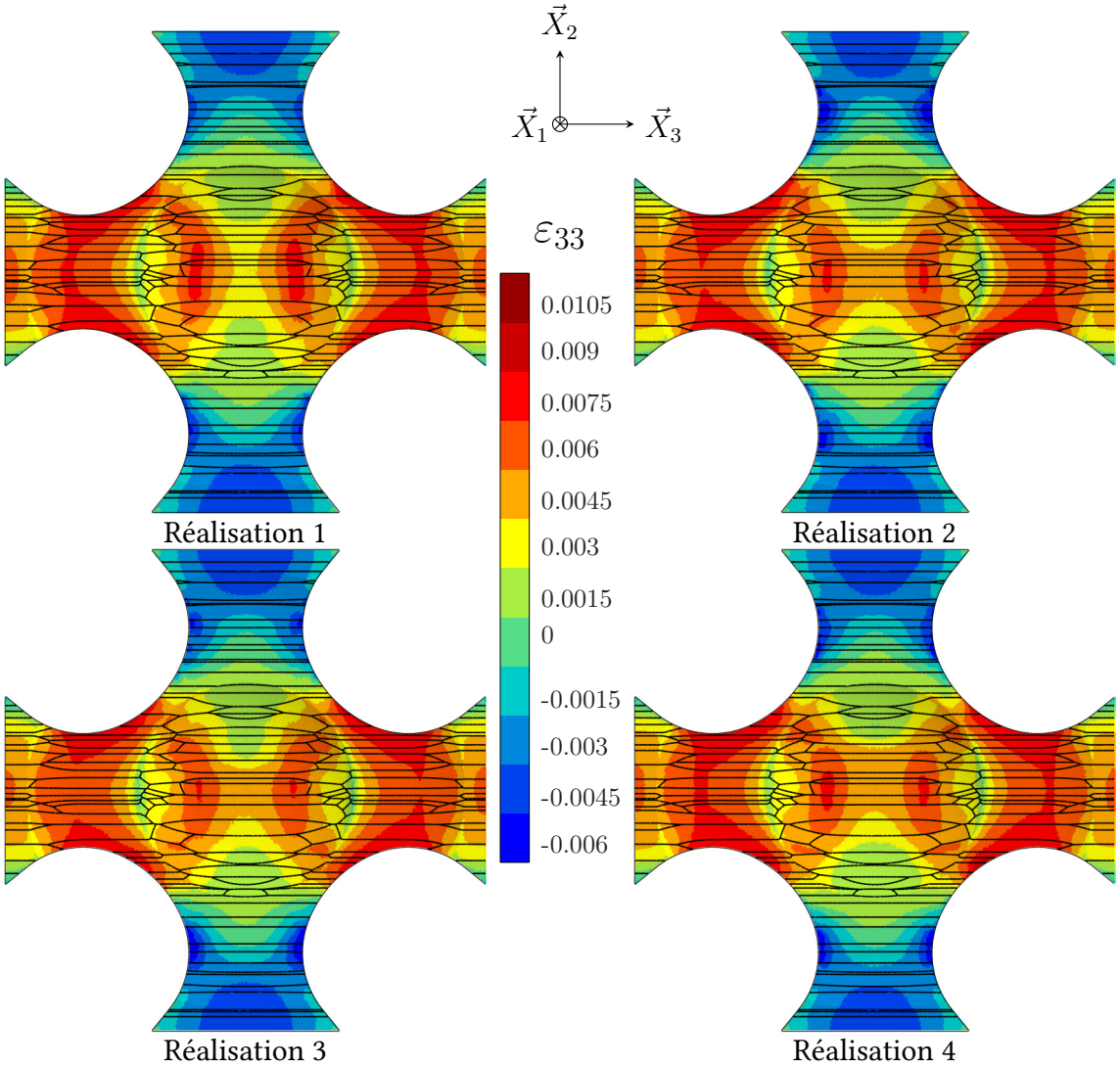


Figure 5.7 – *Cartes des déformations longitudinales ε_{33} pour une modélisation en champ complet utilisant la même morphologie et position des grains et 4 jeux différents d'orientations cristallographiques.*

atteint le seuil de plasticité.

Pour comparer les prévisions globales du modèle homogène en β, nous montrons les iso-contours de la moyenne sur chaque point de Gauss pour les dix résultats en champ complet et sur les quatre variables de l'étude (Fig. 5.8).

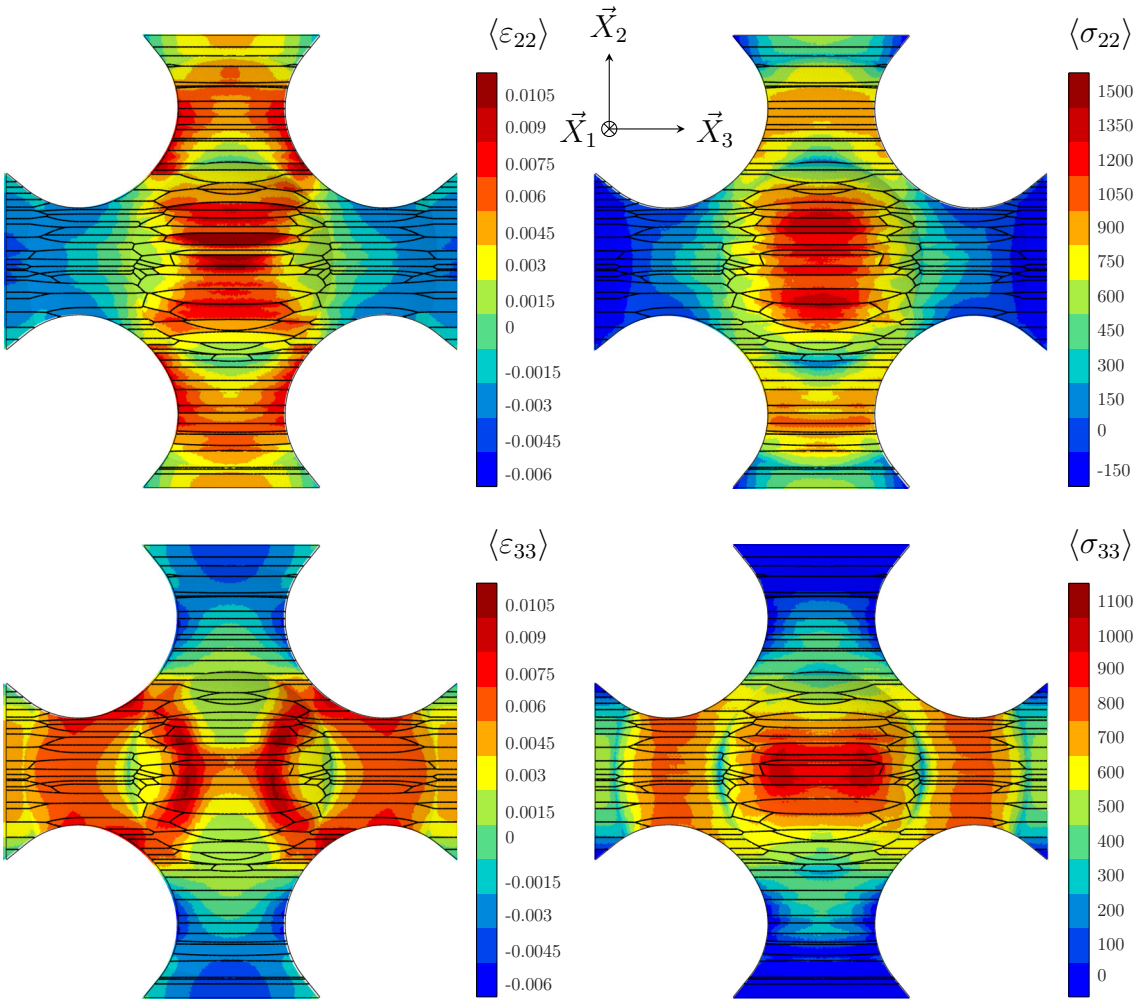


Figure 5.8 – *Iso-contours de la moyenne sur chaque point de* **Gauss** *de la déformation E_{22}, E_{33} et de la contrainte Σ_{22}, Σ_{33} à partir des résultats de 10 réalisations en champ complet.*

Avec les mêmes échelles que sur la modélisation uniforme, les résultats convergent clairement vers les estimations du modèle homogène. Nous observons qu'un faible nombre de réalisations est nécessaire pour obtenir une réponse représentative du comportement global de la structure. Ces résultats démontrent le bon accord du modèle en β avec la réponse moyenne attendue de la structure. Nous pourrions également rajouter des réalisations en modifiant la microstructure entière (forme et répartition des grains). Dans ce cas, un transfert vers un maillage commun est nécessaire pour effectuer la procédure de moyenne. La convergence devrait alors se rapprocher quantitativement des champs macroscopiques du modèle en β. Sur la figure 5.9, les cartographies de l'écart-type pour les dix réalisations vis-à-vis de la moyenne montrent une incertitude qui reste localisée à proximité des joints de grains.

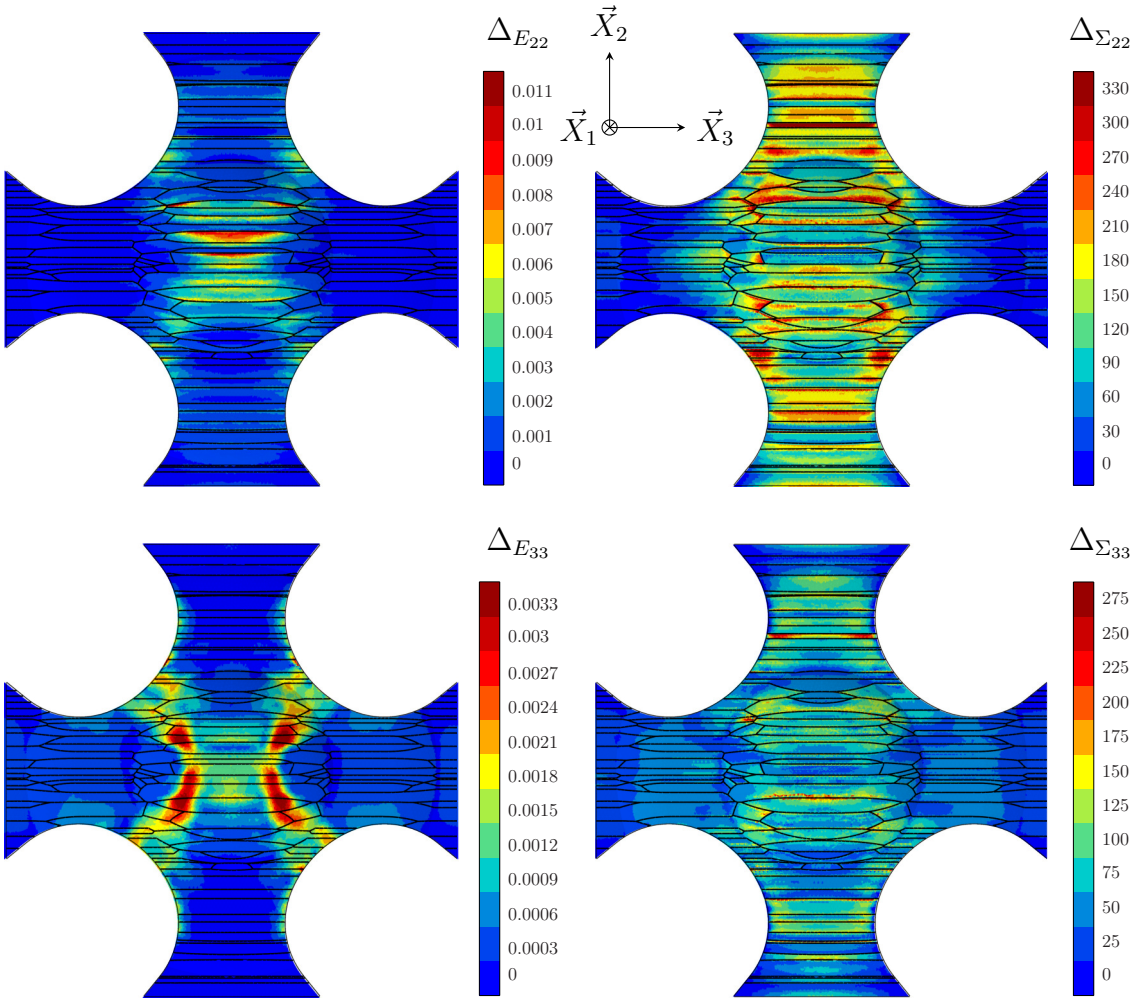


Figure 5.9 – *Cartes de l'écart type sur le champ de la déformation E_{22}, E_{33} et de contrainte Σ_{22}, Σ_{33} à partir des résultats de 10 réalisations en champ complet.*

Ce type de résultat avait déjà été observé sur un volume élémentaire représentatif [Barbe et al., 2003]. C'est là que réside l'intérêt de la méthode en champ complet. Nous avons non seulement la possibilité d'étudier le comportement moyen, mais également la possibilité d'évaluer la dispersion des résultats directement reliés à la texture cristallographique du matériau, et combinés avec les gradients de contraintes issus de la géométrie. Par exemple, un écart type sur la contrainte transverse est mis en évidence. Il peut atteindre 400 à $500\,\mathrm{MPa}$, ce qui représente jusqu'à $30\,\%$ de la valeur maximale pour cette composante. Un constat similaire peut être fait sur l'écart type de la contrainte longitudinale Σ_{33} ou de la déformation transverse E_{22} (l'écart étant similaire à la valeur moyenne). Ces résultats mettent également en lumière l'homogénéité de la déformation longitudinale E_{33}. Visiblement, cette variable est insensible à la texture du matériau, ou du moins tant que nous conservons l'hypothèse de « DS parfait ».

Si le dimensionnement d'une telle structure se base uniquement sur la donnée macroscopique du modèle, on se voit contraint de rajouter des marges pour englober les fluctuations qui proviennent de l'aspect stochastique du problème. Cette sécurité ne doit pas avoir la même ampleur en fonction de la variable considérée et de la position, puisque certaines variables sont plus dispersées que d'autres. Il apparaît donc crucial de pouvoir assister les ingénieurs des bureaux d'études en estimant des bornes capables de tenir compte de l'hétérogénéité macroscopique des alliages DS. Avec plus de réalisations et en ajoutant différents maillages à l'étude, nous pouvons construire des analyses statistiques sur chaque zone géométrique ciblée. Quelle est alors la probabilité d'atteindre une valeur critique pour la composante transverse du tenseur des contraintes ? Il est important de mentionner que sur l'aube de turbine, les grains sont moins sollicités dans l'axe transverse au niveau du profil (ce qui n'est pas vrai pour le pied et le talon) et donc les écart-types vont varier en fonction de la zone d'étude. Dans le profil de l'aube, des fluctuations apparaissent dès qu'on ajoute une désorientation primaire dans les zones fortement sollicitées (bord d'attaque) [Gourdin, 2016].

5.2 Utilisation des variables locales d'un modèle en champ moyen

Pour construire des bornes optimales de la réponse mécanique, la connaissance de la densité de probabilité de chaque variable serait la solution idéale. Cette densité de probabilité devrait être représentative au même titre que celle introduite sur la contrainte axiale dans la partie 2.1 du chapitre 2. Mais cette fois, elle sera différente en chaque point de la pièce à cause des gradients de contraintes développés au sein de la structure. De plus, ce sont les très faibles probabilités qui vont être privilégiées, celles qui se situent dans les queues de distribution. En effet, elles caractérisent des phénomènes rares mais possibles entraînant une remise en question de la tenue de la pièce. Par conséquent, un nombre suffisant de réalisations numériques doit être mené pour atteindre une représentativité en tout point. D'autre part, la distribution des réponses peut ne pas suivre une loi normale et dans ce cas, les seules estimations de la moyenne et de la variance, plus rapides à atteindre, ne suffisent pas à prévoir les valeurs extrêmes.

Dans l'industrie, la méthode par « force brute » consistant à réaliser un grand nombre de calculs peut s'avérer difficile à appliquer pour différentes étapes du dimensionnement. Pour les étapes en amont de la validation, les paramètres de la modélisation sont souvent modifiés (coefficient matériau, chargement, géométrie, ...). Alors, la base de données devient caduque et doit être réactualisée dans son ensemble. Pour ces étapes de design et d'études « amont » jouant

sur la mise en données, une distribution simplifiée doit être obtenue rapidement, par le biais de méta-modèles combinant des approches mécaniques et numériques. C'est pourquoi, nous souhaitons analyser les données plus locales des approches micromécaniques dans le cas d'un calcul de structure et tenter de s'en servir. Il est important de rappeler que ces variables locales sont $a\ priori$ différentes de celles obtenues par la modélisation en champ complet puisqu'elles font référence à une autre échelle, un volume élémentaire représentatif, et à des hypothèses de désordre parfait, ce qui n'est pas le cas dans les structures oligogranulaires étudiées. Nous avons pu remarquer dans le chapitre 4 que l'encadrement fourni par les estimations locales de la règle en β sont en bon accord avec les dispersions expérimentales générées par la texture spécifique du matériau. Cependant, les techniques expérimentales utilisées sont limitées en résolution spatiale, ce qui ne permet pas d'obtenir les bornes minimales et maximales pour des champs mesurés à proximité des joints de grains. Nous proposons d'effectuer une comparaison « calcul-calcul » approfondie et plus systématique en confrontant les champs locaux issus du modèle à champ moyen avec les résultats obtenus avec des microstructures explicitement décrites.

5.2.1 Localisation du modèle à champs moyens

Afin de réaliser des comparaisons quantitatives sur les champs obtenus par des modélisations en champ complet et en champ moyen, il est nécessaire de travailler avec le même maillage. La première solution, idéale, consiste à réaliser le calcul en champ moyen directement sur le maillage plus fin des calculs en champ complet. Il faut s'attendre alors à des temps calculs bien plus élevés que pour le calcul sur un maillage grossier. De plus, si nous devons comparer les résultats qui proviennent de plusieurs géométries de grains différentes, le calcul avec le modèle en β devrait être refait à chaque fois. Pour éviter ce calcul coûteux, nous proposons de réaliser un transfert de champ, en reportant les résultats du calcul en champ moyen, dont les gradients sont relativement faibles, depuis leur maillage « grossier » vers le maillage plus fin utilisé pour les calculs en champ complet. Pour cela, nous utilisons un algorithme de type « Nearest Gauss Point » comme décrit sur le schéma 5.10 (première partie intitulée « TRANSFERT »).

Cette procédure introduit une dépendance du résultat au maillage initial sur lequel nous réalisons le calcul homogène. Nous n'avons pas réalisé une étude de sensibilité au maillage. Toutefois, elle nous semble faible sur le cas présent puisque l'erreur ne dépend que de la résolution spatiale au niveau des forts gradients générés par la structure. Les hétérogénéités microstructurales ont peu d'impact à ce stade, car les résultats du calcul en champ moyen, qui introduit un milieu continu à l'échelle de la structure, présentent des gradients relativement faibles : pour l'éprouvette cruciforme, il n'existe pas de saut brutal des champs réponses (comme le montre la figure 5.4). Nous supposerons que la taille d'éléments est faible comparée à la variation de chargement : nous avons tout de même densifié le maillage dans la zone utile, là où les plus grandes variations des champs sont perceptibles.

Pour chaque réalisation, la procédure de localisation consiste pour chaque point de **Gauss** à :

- déterminer l'orientation cristallographique assignée dans le calcul en champ complet ;
- introduire les estimations locales du modèle en β correspondant à la phase cristallographique de même orientation ;
- renommer ces variables avec les appellations utilisées dans la loi de comportement locale du modèle en champ complet.

Toute la procédure est illustrée par la figure 5.10.

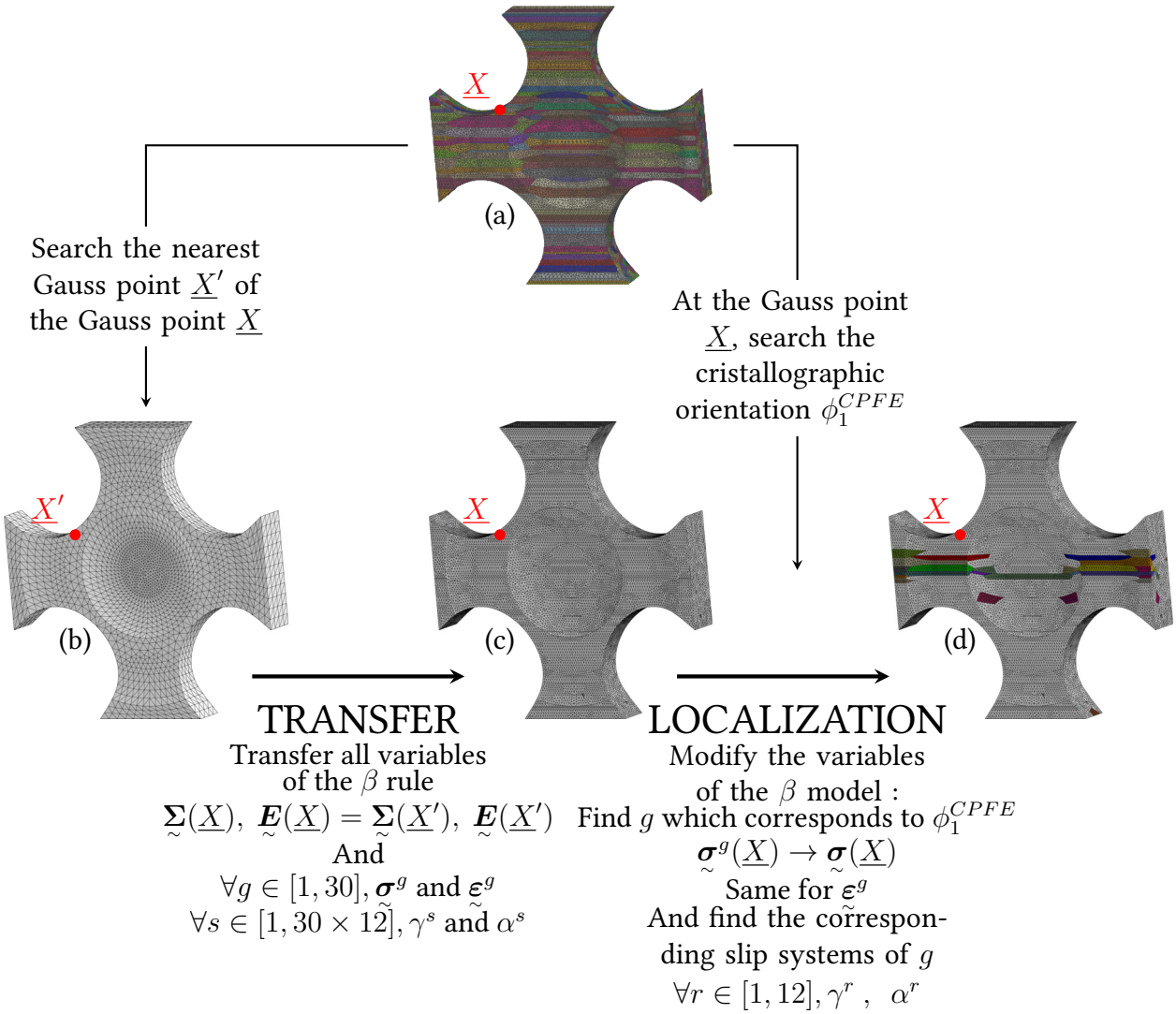


Figure 5.10 – *Schéma de principe permettant de comparer les cartes des variables locales obtenues par un modèle en champ moyen vis-à-vis d'un calcul en champ complet composé d'une étape de transfert et d'une étape de localisation. (a) Maillage utilisé pour le calcul en champ complet. (b) Maillage utilisé pour le calcul avec le modèle en β. (c) Transfert des variables issues du calcul (b) sur la maillage (a). (d) Sélection des orientations pertinentes (utilisées dans le calcul en champ complet) dans (c) et projection sur (d).*

Dans la construction du modèle micromécanique, les lois de comportement à l'échelle locale (grains) sont les mêmes que dans le calcul en champ complet. Il est donc possible de trouver une équivalence pour chaque variable dans les deux modélisations. Par exemple, la figure 5.11 montre les cartographies de la contrainte longitudinale à partir d'un seul calcul en β ; d'un côté la variable macroscopique et de l'autre la variable « locale » pour deux jeux d'orientations cristallographiques précédemment utilisés pour les calculs complets (présentés également). Ces résultats sont obtenus de manière "rapide" (une dizaine de minutes) en post-processing.

Nous observons un effet bénéfique de cette « localisation » sur la réponse en contrainte dans la

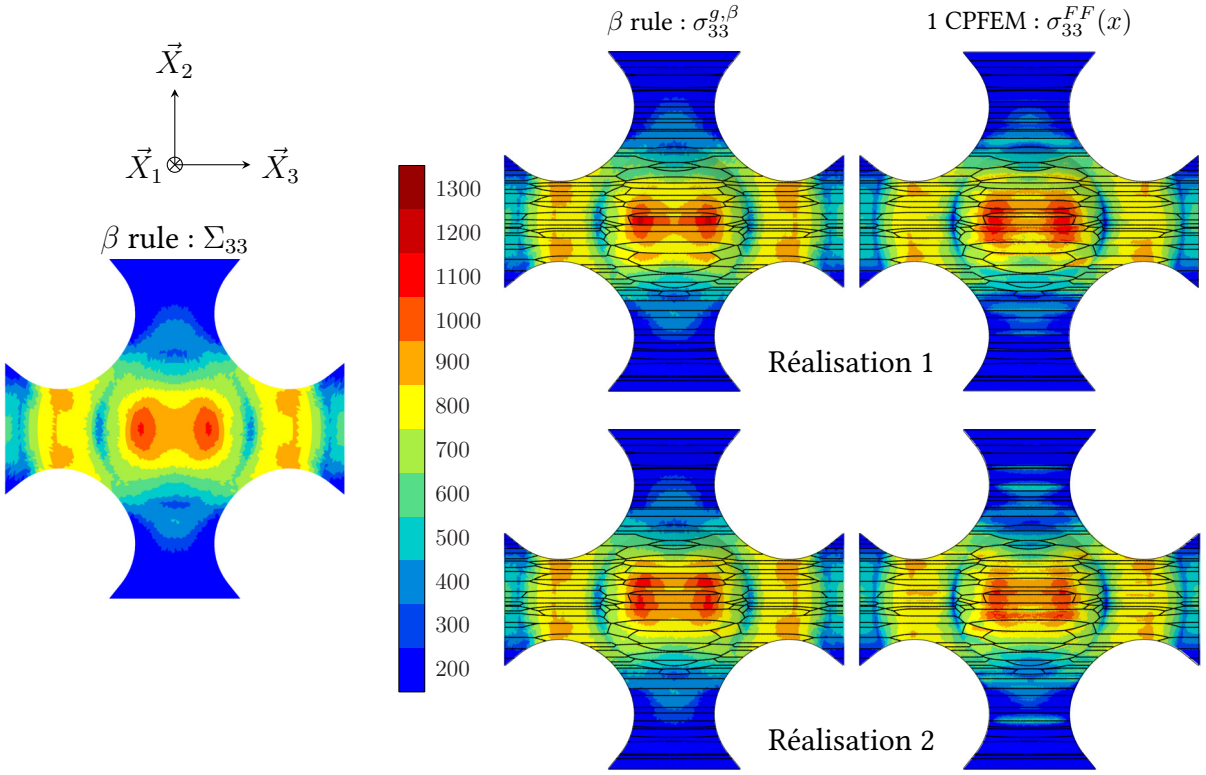


Figure 5.11 – *Comparaison des cartes de la contrainte σ_{33} pour la règle en β après application de la procédure de localisation pour deux calculs en champ complet.*

direction longitudinale. Même si celle-ci n'est pas vraiment franche puisque nous avons déjà mentionné l'homogénéité de cette variable dans le domaine élastique. La figure 5.12 montre le champ de la déformation transverse, macroscopique et localisé, qui est plus dispersée en fonction des différentes réalisations en champ complet.

Nous remarquons que qualitativement, les localisations de la déformation sont dans les mêmes zones pour les valeurs localisées de la règle en β et les calculs en champ complet correspondants. Toutefois, en mettant les deux résultats à la même échelle, nous observons une sous-estimation nette des estimations de la loi homogène. Même si notre approche auto-cohérente permet de se rapprocher du résultat en champ complet, l'écart sur la valeur reste encore trop important à proximité des joints de grains (un facteur 2 dans certains cas). La même conclusion peut être formulée en regardant les prévisions du modèle localisé sur l'activité plastique (voir la figure 5.13).

Avec la procédure de localisation, nous obtenons une équivalence entre l'activité plastique calculée pour les approches en champ complet et en champ moyen : les douze systèmes de glissement font référence dans chaque modèle au même plan et à la même direction de glissement. Nous utilisons la somme des intensités du glissement sur chaque système comme indicateur. Une faible dépendance à la texture pour la règle en β localisée est finalement observée. Les deux résultats, représentant la projection des variables locales pour deux jeux d'orientations cristallographiques, sont semblables. A l'inverse, les deux résultats en champ complet sont très différents. En résumé, cette étape de post-traitement permet de prévoir les zones les plus sollicitées et d'avoir une idée des niveaux de déformation ou de contrainte, mais les valeurs obtenues sont trop éloignées des valeurs extrêmes issues des calculs en champ com-

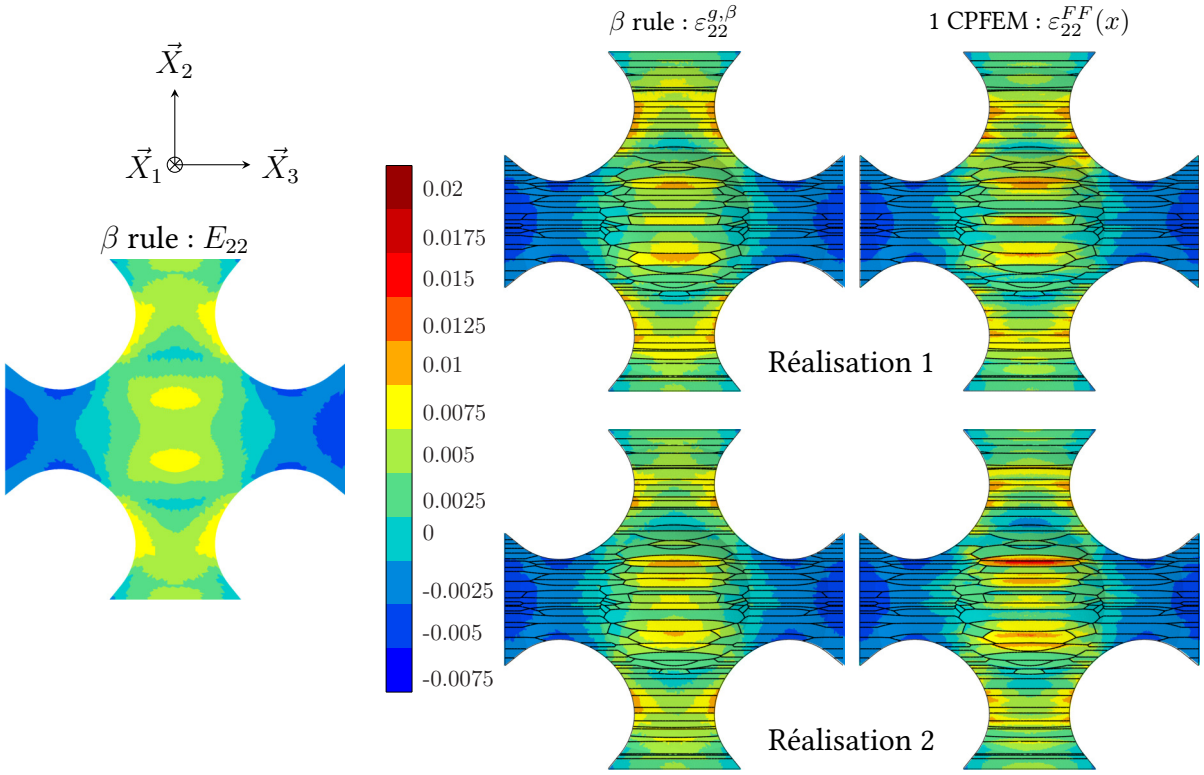


Figure 5.12 – *Comparaison des cartes de la déformation ε_{22} pour la règle en β après application de la procédure de localisation pour deux calculs en champ complet.*

plet pour pouvoir construire un modèle de durée de vie suffisamment fiable. Par ailleurs, le champ résultat présente un défaut notoire, c'est qu'il n'est pas en équilibre sur la structure. De fait, l'équilibre a été vérifié au niveau de la contrainte moyenne du modèle, mais pas sur les contraintes locales finalement extraites en chaque point.

5.2.2 Equilibrage des valeurs moyennes par phase cristallographique

Afin de produire sur une réalisation donnée des grains dans la structure, des champs qui vérifient en même temps les relations de comportement et les équations d'équilibre, nous ajoutons maintenant une étape de rééquilibrage. Le post-traitement décrit au paragraphe précédent permet d'obtenir un champ de variables d'états sur la réalisation particulière, qui va être utilisée pour initialiser un ou plusieurs incréments de calcul supplémentaire. L'objectif est de faire ressortir les joints de grains, qui vont jouer un rôle important dans l'opération d'équilibrage.

Cas simple d'un agrégat DS

La méthode est d'abord employée sur un cas simple, celui du maillage Voro-N, qui représente un volume élémentaire du matériau DS, précédemment utilisé dans les chapitres 2 et 3. Dans ce paragraphe, l'étude consiste à simuler une traction simple dans une direction transverse en imposant un déplacement uniforme sur une face du maillage et en bloquant les nœuds de la face opposée dans cette direction (les mouvements de corps rigide sont également bloqués). Nous n'appliquons pas de conditions de périodicité dans ce calcul car nous estimons qu'un biais pourrait alors apparaître dans la comparaison. Pour le calcul avec la règle en β, le volume se déforme de manière homogène puisque toutes les phases sont introduites à tous les

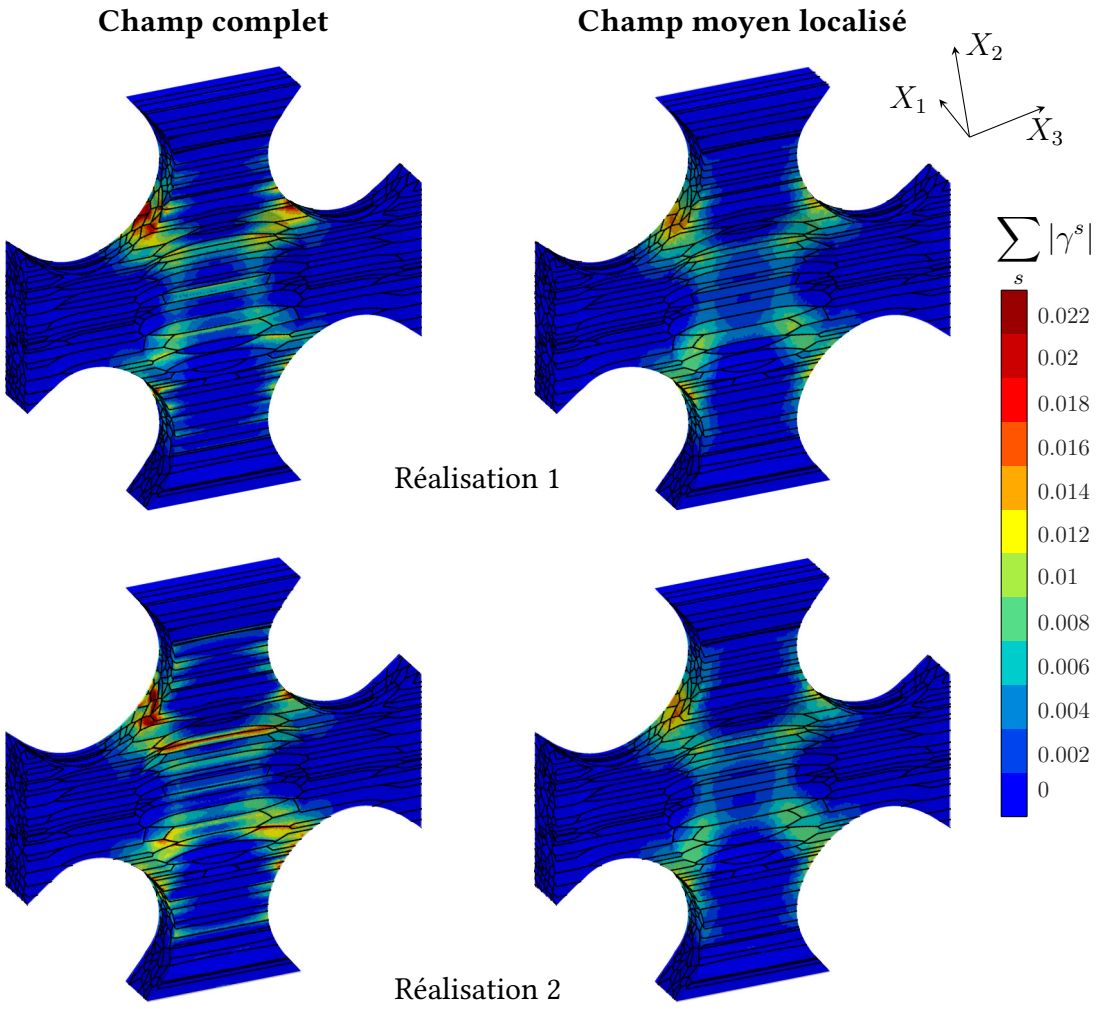


Figure 5.13 – *Comparaison des cartes de la somme des intensités de glissement* $\sum_s |\gamma^s|$ *pour la règle en* β *après application de la procédure de localisation pour deux réalisations en champ complet.*

points de **Gauss**. Localiser le résultat sur un maillage explicite de la microstructure avec un déplacement homogène aux bords, puis faire un équilibrage avec des conditions périodiques peut s'avérer différent d'un calcul en champ complet entièrement mené avec des conditions périodiques. Tout de même, nous mentionnons que ces calculs avec des conditions périodiques ont également été menés mais ne sont pas présentés.

Nous proposons de commencer par la réalisation d'un calcul avec la règle en β jusqu'à un déplacement de $1\,\mathrm{mm}$ (équivalent à une déformation moyenne de $1\,\%$). Premièrement, la procédure de transfert est utilisée pour projeter le résultat du modèle en champ moyen sur le maillage avec la microstructure explicite. Cette étape n'induit aucune erreur puisque les variables transférées sont homogènes sur le volume. L'avantage est d'utiliser pour ce calcul un maillage très grossier [1], si bien que le temps de la résolution du problème est très rapide. Ensuite, les valeurs locales du modèle sont sélectionnées par la procédure de localisation. Elles se réfèrent aux orientations cristallographiques assignées à chaque point de Gauss du calcul en champ complet associé. Puisque les variables du modèle en β sont homogènes sur le volume, les valeurs localisées sont elles aussi homogènes par grains et deux grains avec la même orientation ont les mêmes variables locales (voir par exemple la figure 5.14a.).

Les champs de la déformation, contrainte et variables d'écrouissage extraits du calcul avec la règle en β représentent maintenant une certaine hétérogénéité intergranulaire, mais ils ne vérifient pas la condition d'équilibre. L'opération de rééquilibrage consiste alors à faire une résolution à partir de ces conditions initiales sur un incrément de déplacement nul. Cette manipulation se fait dans le code de calcul Zset [Z-set 8.6, 2016] par l'intermédiaire de la fonction *initialize_with_transfert*, qui permet d'initialiser un calcul avec des variables d'état non nulles. Il suffit donc de débuter le calcul d'équilibrage avec des valeurs initiales données par les estimations locales de la règle en β bien sélectionnées. Les figures 5.14 et 5.15 montrent respectivement les cartes de la composante ε_{11} du tenseur des déformations et de la contrainte équivalente de **von Mises** pour les différentes opérations : (a) localisation « brute » issue de la règle en β, (b) champ obtenu après équilibrage avec un déplacement fixé et (c) résultat du calcul en champ complet correspondant au même maillage et jeu d'orientations.

Nous observons sur ces deux résultats que la procédure permet bien de recréer une fluctuation supplémentaire induite par un voisinage décrit explicitement. Pour la déformation axiale, la dispersion est même plus élevée que celle observée sur la simulation de référence en champ complet. Pour le champ de la contrainte équivalente de **von Mises**, les résultats sont presque plus éloignés que les valeurs « brutes » issues du modèle en champ moyen. Nous découvrons que, dans ce cas test, la procédure trouve un champ équilibré par le biais de « décharges élastiques » des zones trop déformées. Pour preuve, les variables internes régissant le comportement non linéaire du matériau n'ont pas évolué durant l'opération (voir la figure 5.16).

Pourtant, la règle en β fournit initialement des estimations de l'activité plastique cohérente vis-à-vis de l'intensité du glissement obtenu avec un calcul complet. Nous montrons sur la figure 5.17 la carte de la déformation plastique cumulée après la procédure d'équilibrage. Comme cette variable est une variable auxiliaire, elle n'est pas initialisée et débute avec une valeur nulle. Ainsi, ce qui est montré correspond à la déformation plastique se formant sur l'incrément d'équilibrage : l'activité plastique est inexistante sauf dans quelques zones très ponc-

1. Il est possible de réaliser le calcul sur un seul élément avec la règle en β. Dans notre cas, nous utilisons un quadrillage composé de 16 éléments quadrangles C3D20 (1 élément dans l'épaisseur) car les algorithmes de transfert/localisation utilisés nécessitent d'avoir plusieurs éléments dans le maillage initial

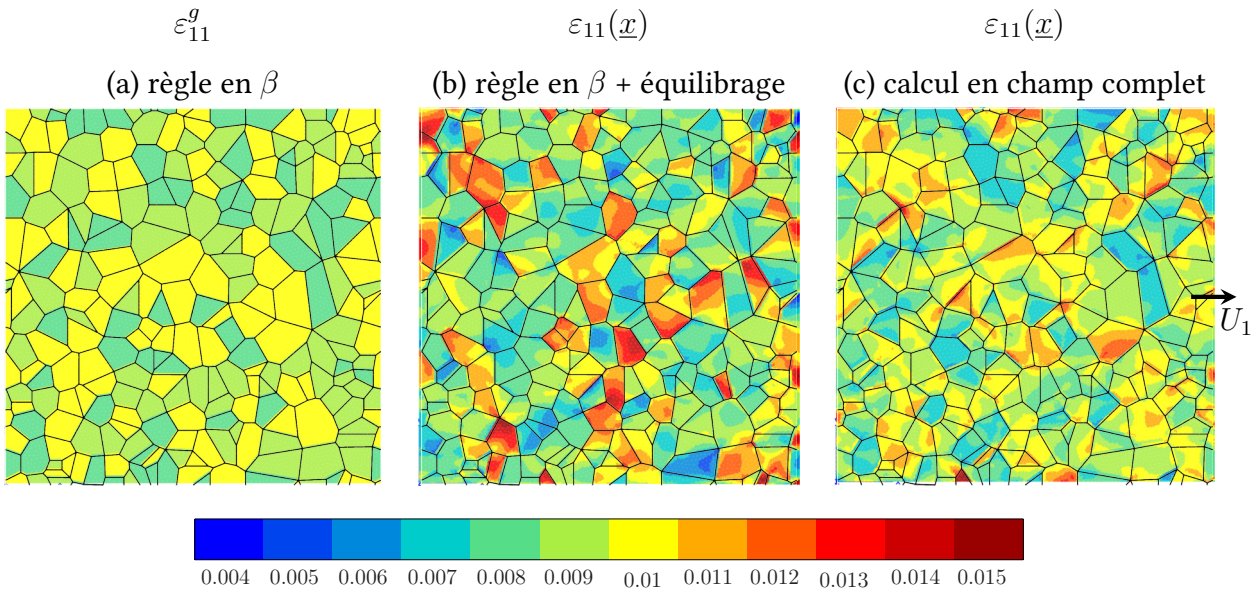


Figure 5.14 – *Cartes de la composante ε_{11} du tenseur des déformations après une traction simple en déplacement imposé (a) champs locaux issus de la règle en β, (b) après la procédure d'équilibrage à déplacement fixé et (c) pour le calcul CPFE complet.*

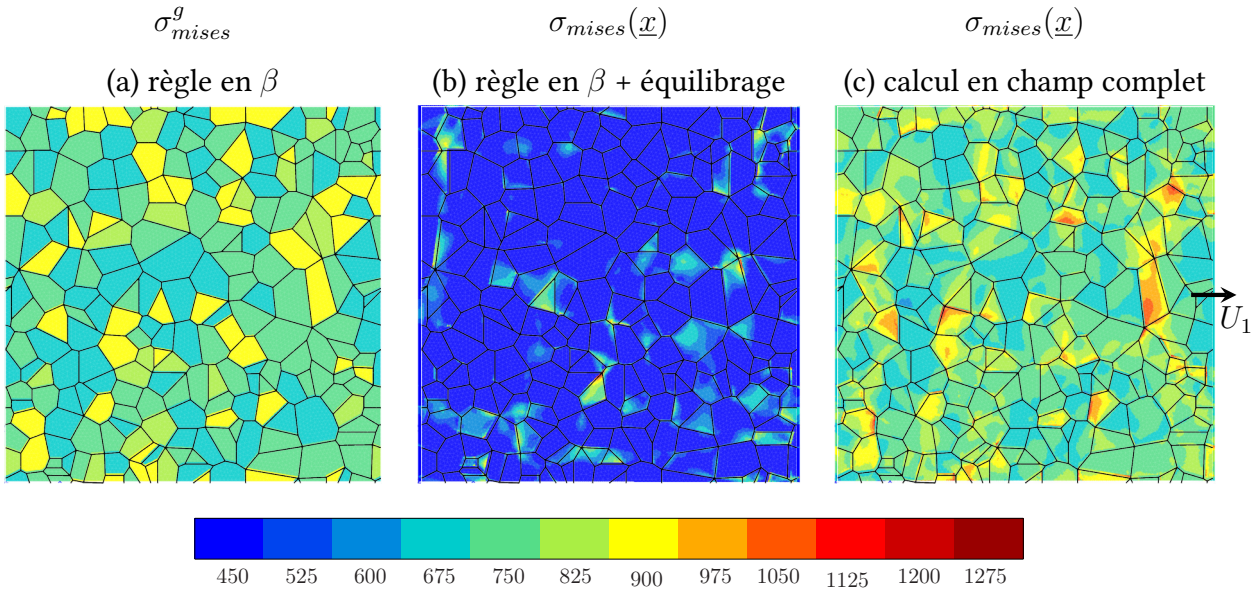


Figure 5.15 – *Cartes de la contrainte équivalente σ_{mises} après une traction simple en déplacement imposé après (a) une procédure de transfert et de localisation des estimations de la règle en β, (b) après la procédure d'équilibrage sur un incrément de déplacement nul et (c) pour le calcul CPFE complet.*

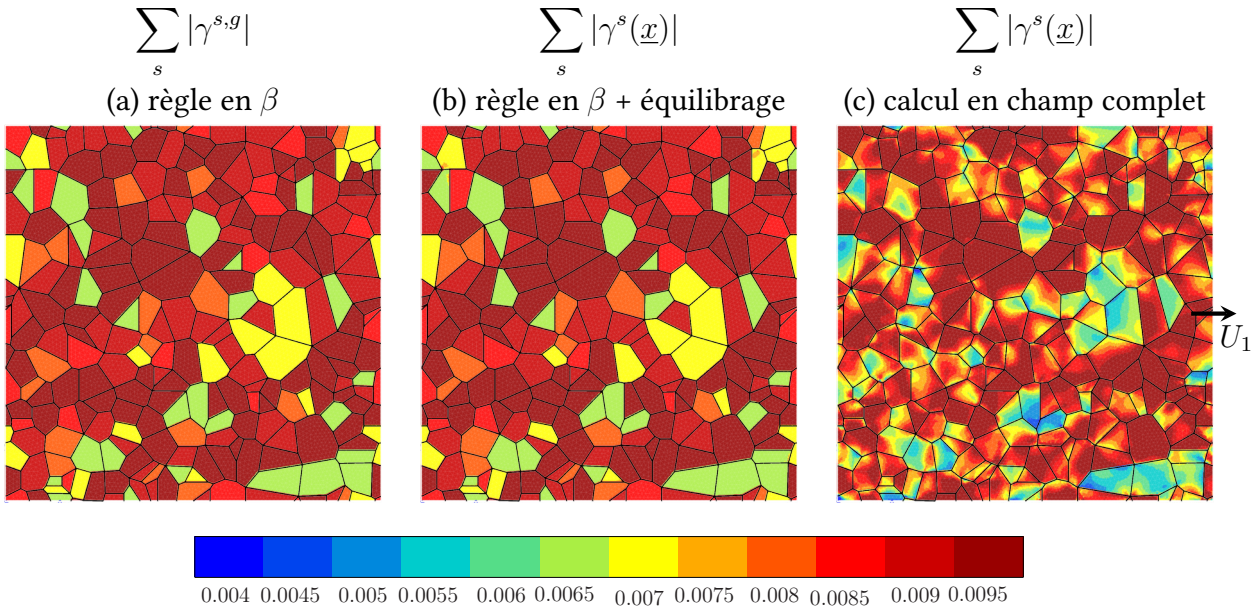


Figure 5.16 – *Cartes de la somme des intensités de glissement sur chaque système* $\sum_s |\gamma^s|$ *à la fin d'une traction simple en déplacement imposé après (a) une procédure de transfert et de localisation des estimations de la règle en* β*, (b) après la procédure d'équilibrage sur un incrément de déplacement nul et (c) pour le calcul CPFE complet.*

tuelles se situant aux interfaces.

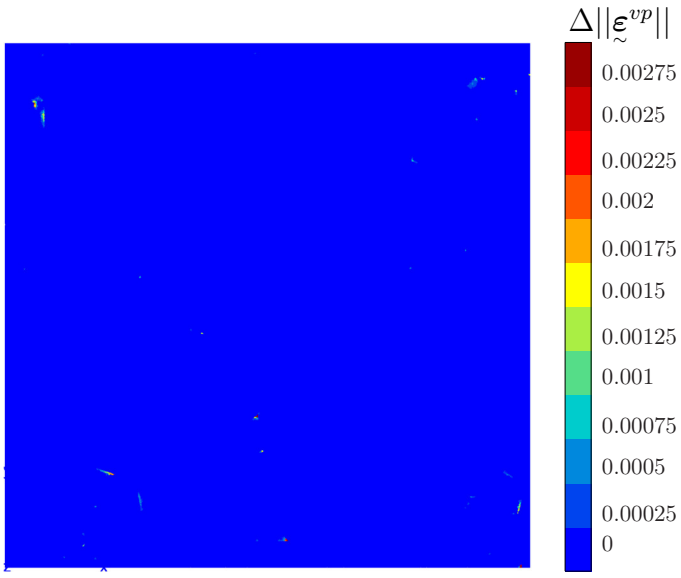


Figure 5.17 – *Carte de la déformation plastique cumulée générée lors de l'incrément d'équilibrage.*

Nous associons cela en partie aux conditions aux limites appliquées sur l'incrément de résolution. Durant la recherche de la solution équilibrée, aucune condition sur la charge n'est introduite. Ainsi, les zones « trop déformées » vont subir une décharge élastique, permettant

d'assurer un équilibre tout en maintenant le déplacement à $1\,\mathrm{mm}$. Avec le module d'élasticité important qui a été utilisé (issu des paramètres du CMSX4 à $650\,°\mathrm{C}$, il est facile d'obtenir une contrainte nulle, seulement en diminuant de $0{,}5\,\%$ la déformation axiale. Finalement, des valeurs extrêmement faibles de la contrainte équivalente de **von Mises** sont observées sur la figure 5.15. Le graphe 5.18a illustre le phénomène de décharge qui semble conduire aux grandes différences obtenues entre les champs locaux après équilibrage et ceux du calcul de référence en champ complet.

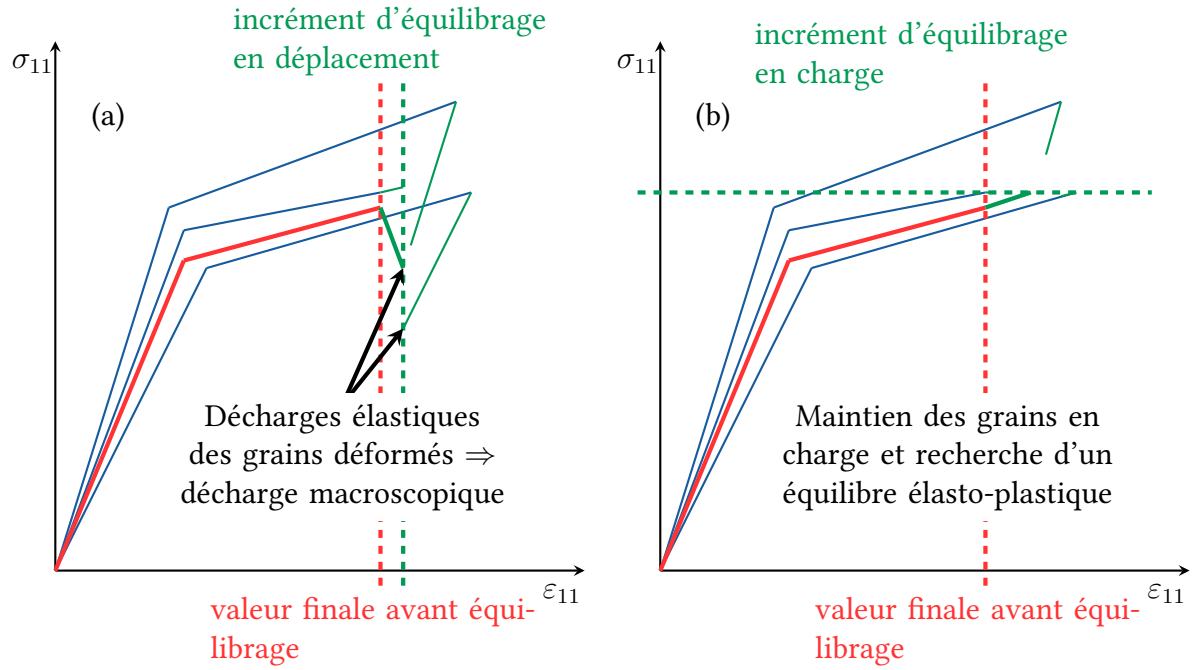


Figure 5.18 – *(a) Schéma représentant le phénomène de décharge élastique locale du volume afin de satisfaire l'équilibre des champs de déformation par un incrément de calcul en déplacement imposé et (b) ce que pourrait induire un incrément en charge imposée.*

Néanmoins, il est difficile d'expliquer une chute de la charge globale de près de $60\,\%$ uniquement par cette proposition. Nous avons donc analysé l'évolution de certaines composantes du tenseur des contraintes durant l'étape d'équilibrage, qui sont comparées à l'état des contraintes pour un calcul de référence en champ complet. Sur la figure 5.19, les contraintes axiales résiduelles σ_{22} et σ_{33} sont montrées en fonction de la contrainte axiale principale σ_{11} en chaque point géométrique pour les différentes opérations.

Premièrement, il faut noter que l'hétérogénéité de la contrainte estimée par le modèle en champ moyen est très faible par rapport aux valeurs obtenues par le calcul en champ complet. A l'inverse, l'étape de rééquilibrage en déplacement génère une dispersion des contraintes bien plus grande que pour le calcul en champ complet. En particulier, certains points situés dans des grains avec une orientation cristallographique $\phi_1 \in \{0°, 3°, 87°\}$ passent en compression axiale durant le rééquilibrage, ce qui n'est pas réaliste pour une traction. De manière globale, le nuage de points issu du rééquilibrage est décalé vers les faibles valeurs de contrainte axiale σ_{11} ; cette décharge était déjà observée sur le champ de la contrainte équivalente de **von Mises**. Il y a une redistribution des contraintes qui n'est pas bien contrôlée et qui diffère de

(a) règle en β

(b) règle en β + équilibrage

(c) Calcul en champ complet

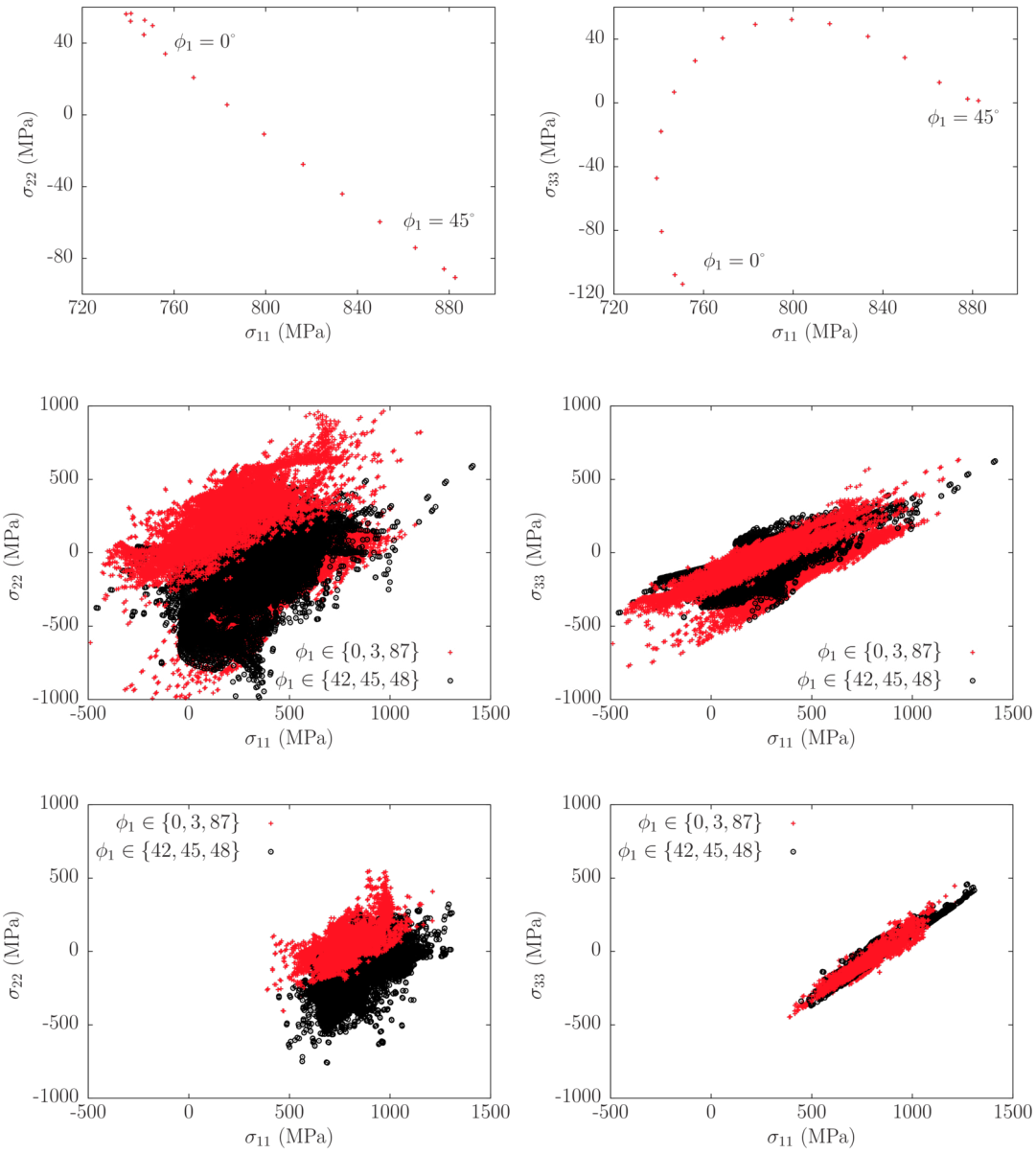


Figure 5.19 – *Nuages de points de la contrainte résiduelle σ_{22} et σ_{33} en fonction de la contrainte axiale principale σ_{11} à tous les points de Gauss pour : (a) la règle en β (un point par orientation cristallographique), (b) après un rééquilibrage avec un maintien du déplacement (deux lots d'orientations cristallographiques sont présentés) et (c) pour un calcul en champ complet.*

celle constatée sur une simulation en champ complet. Pour qualifier cette redistribution, la figure 5.20 montre comment cela se répercute sur le coefficient de triaxalité des contraintes, défini comme le rapport de la contrainte hydrostatique sur la contrainte équivalente de **von Mises**.

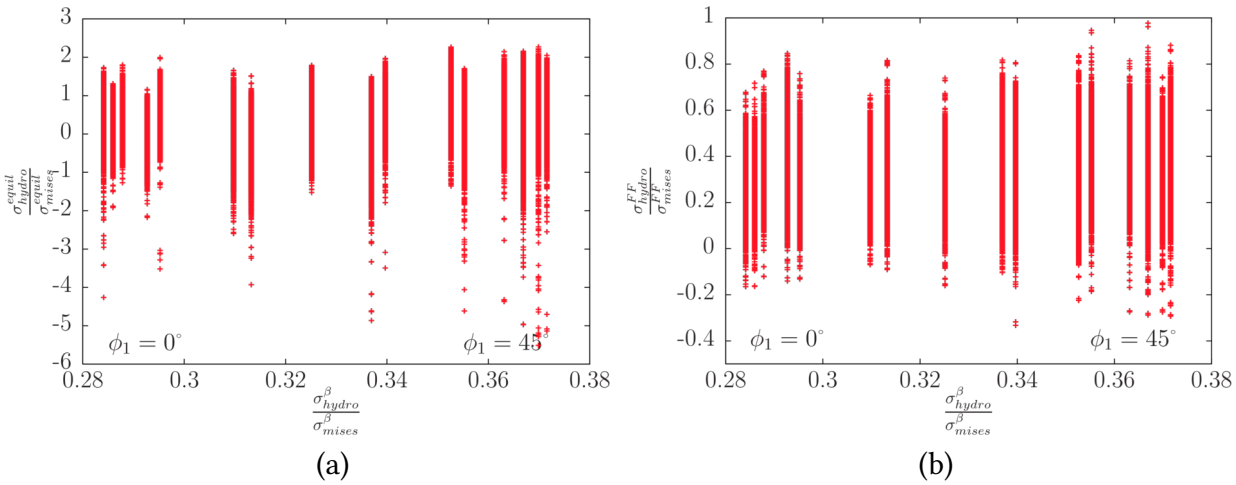


Figure 5.20 – *Graphe du coefficient de triaxalité par orientation cristallographique calculé à partir des estimations locales du modèle en β et comparé aux valeurs (triées par orientation) obtenus sur tous les points de Gauss pour : (a) la procédure de rééquilibrage sur un incrément de déplacement nul et (b) pour la simulation en champ complet.*

Sur les estimations issues du modèle en champ moyen (point de départ), le coefficient de triaxalité des contraintes est très proche du cas « traction uniaxiale » (valeur de 0,3) pour chaque orientation cristallographique : chaque ligne verticale sur la figure 5.20 fournie en abscisse la valeur fournie par la règle en β pour une phase cristallographique. Sur la figure 5.20a, nous observons des valeurs erronées du coefficient de triaxalité pour le champ rééquilibré sur un incrément de déplacement nul par rapport aux valeurs issus de la simulation en champ complet (voir Fig.5.20b). En particulier, ce coefficient peut prendre des valeurs bien inférieures à -1. Finalement, nous ne trouvons pas les mêmes degrés de triaxalité au sein de l'agrégat en utilisant les deux modélisations.

Equilibrage sur un incrément en charge imposée

Le maintien du déplacement durant le calcul d'équilibrage conduit à une réponse qui n'est pas satisfaisante sur les champs locaux de la contrainte. Nous avons alors réalisé la même démarche avec un rééquilibrage à force constante. Nous imposons la valeur de la force résultante d'un déplacement de $1\,\mathrm{mm}$, imposé précédemment dans le calcul homogène avec la règle en β (Fig. 5.18b). Dans ces conditions, l'algorithme cherche une solution en évitant les décharges élastiques importantes pour conduire, macroscopiquement, à la charge finale demandée. Ainsi, il n'y a pas d'autre choix que de réactualiser la plasticité dans les zones pas suffisamment déformées. Les figures 5.21, 5.22 et 5.23 montrent respectivement la composante transverse ε_{11} du tenseur des déformations, la contrainte équivalente de **von Mises** et la somme des intensités de glissement pour les trois types de résultats (localisation, équilibrage ou calcul en champ complet).

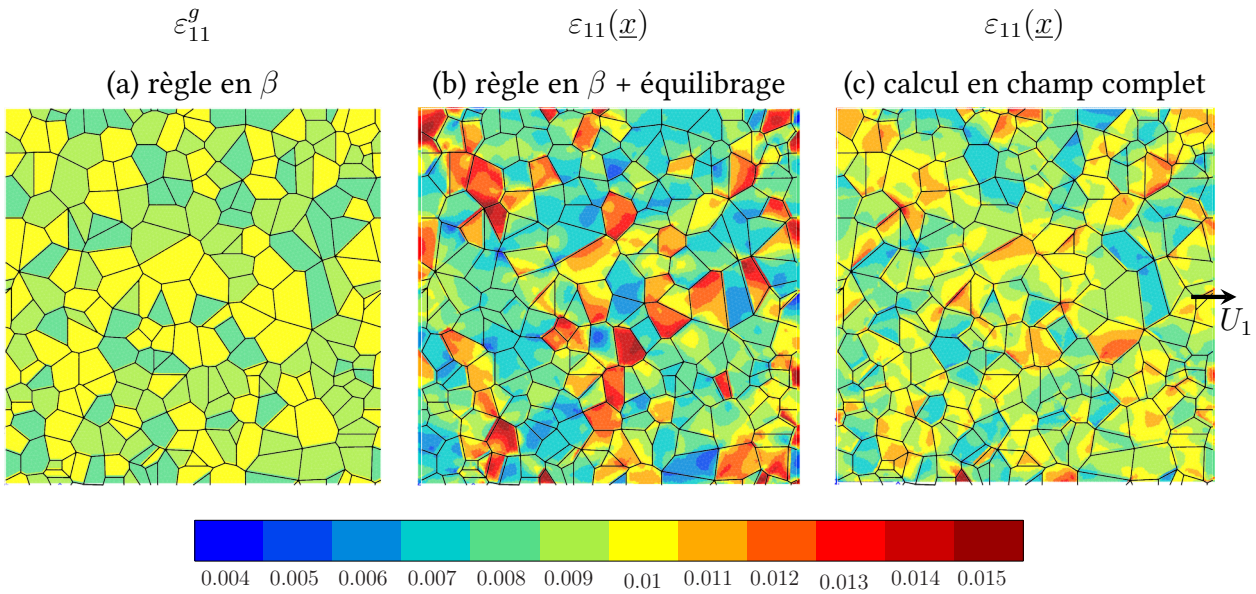


Figure 5.21 – *Cartes de la composante ε_{11} du tenseur des déformations après une traction simple en déplacement imposé (a) champs locaux issus de la règle en β, (b) après la procédure d'équilibrage à charge fixée et (c) pour le calcul CPFE complet.*

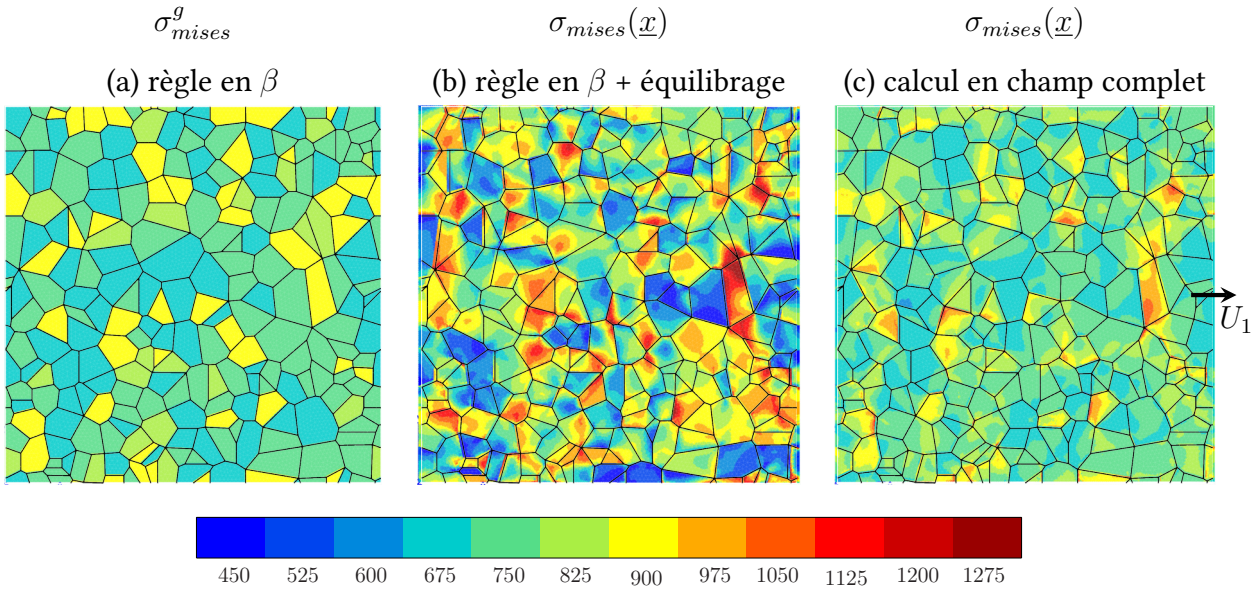


Figure 5.22 – *Cartes de la contrainte équivalente σ_{mises} après une traction simple en déplacement imposé (a) champ issu de la procédure de transfert et de localisation des valeurs de la règle en β, (b) après la procédure d'équilibrage à charge fixée et (c) pour le calcul CPFE complet.*

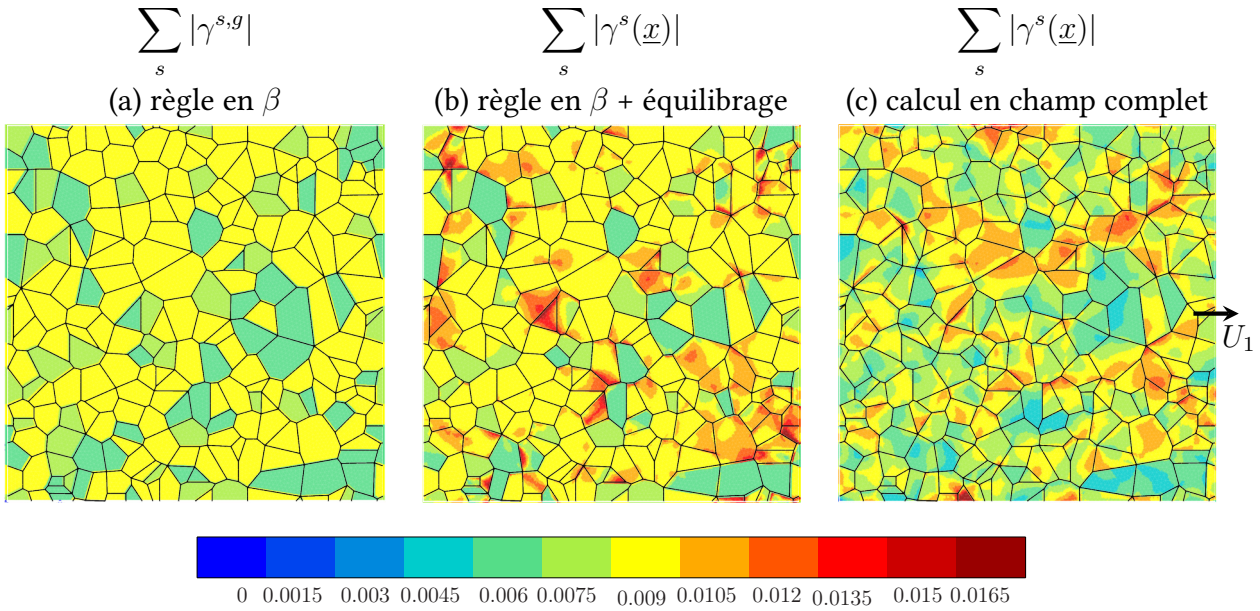


Figure 5.23 – *Cartes de la somme des intensités de glissement sur chaque système* $\sum_s |\gamma^s|$ *à la fin d'une traction simple en déplacement imposé après (a) une procédure de transfert et de localisation des estimations de la règle en* β*, (b) après la procédure d'équilibrage sur un incrément de charge nulle et (c) pour le calcul CPFE complet.*

Nous remarquons une nette amélioration dans l'efficacité de la procédure. De manière générale, les fluctuations intragranulaires sont reconstruites avec des valeurs « en accord » avec la modélisation en champ complet. Pour la déformation transverse, on remarque que certains grains sont fortement déformés dans le calcul après équilibrage à l'inverse du calcul en champ complet. Dans certains cas, ces zones ne sont pas situées sur les mêmes grains pour les deux simulations. Cette erreur peut provenir de la non prise en compte de l'historique de déformation au cours du trajet. Certaines zones peuvent être protégées dans le domaine élastique ($e.g.$ grain dur entouré de grains mous) et par conséquent ne pas avoir une déformation aussi importante que la valeur estimée par la procédure d'équilibrage. Le résultat le plus encourageant concerne la somme des intensités de glissement (voir Fig.5.23). Les cartographies issues des deux types d'approches sont très proches, preuve qu'avec un équilibrage à charge fixée, la résolution du problème d'équilibre est élasto-viscoplastique. En conséquence, le nombre d'itérations pour ce processus augmente et passe de 4 itérations pour converger sur un incrément en déplacement à 12 pour un calcul avec un incrément en maintien de charge. Afin de mieux comprendre comment se redistribuent les contraintes dans l'agrégat durant cette étape, nous avons également tracé les graphes des contraintes résiduelles axiales σ_{22} et σ_{33} en fonction de la contrainte axiale principale σ_{11} (voir Fig.5.24).

On remarque une dispersion plus significative des contraintes pour la procédure d'équilibrage par rapport au calcul en champ complet. C'est le même constat que dans le paragraphe précédent. Toutefois, deux différences peuvent être relevées : (i) il n'y a plus de points passant en compression axiale et la valeur moyenne des contraintes est cohérente avec celle obtenue pour le calcul en champ complet et (ii) les points semblent « ordonnés » en fonction de l'orientation cristallographique : pour une orientation cristallographique $\phi_1 \in \{0, 3, 87\}$, les valeurs sont majoritairement situées dans la partie forte contrainte σ_{22} et faible contrainte σ_{11} par

(a) règle en β

(b) règle en β + équilibrage

(c) Calcul en champ complet

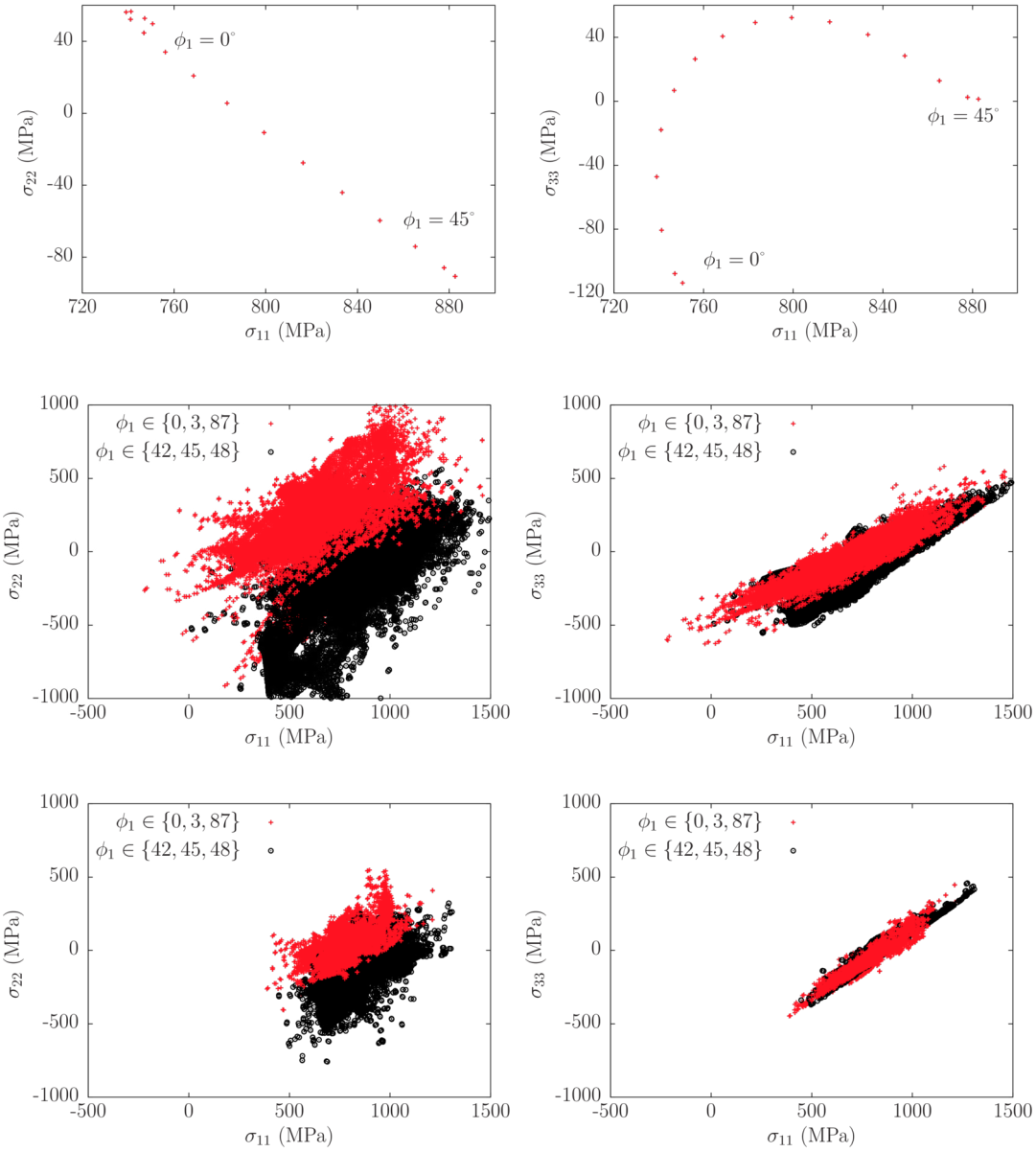


Figure 5.24 – *Nuages de points des contraintes résiduelles axiales σ_{22} et σ_{33} en fonction de la contrainte axiale principale σ_{11} à tous les points de Gauss pour : (a) la règle en β (un point par orientation cristallographique), (b) après un rééquilibrage avec un maintien de la charge (deux lots d'orientations cristallographiques sont présentées) et (c) pour un calcul en champ complet (deux lots d'orientations cristallographiques sont présentées).*

rapport aux orientations $\phi_1 \in \{42, 45, 48\}$; c'est le même ordre estimé par la règle en β. Cette hiérarchisation semble également en accord avec le résultat en champ complet. Nous n'observions pas cette cohérence lors d'un équilibrage avec maintien du déplacement. En imposant un maintien en charge, il y a une conservation générale de la triaxalité des contraintes au sein de l'agrégat. Pour le vérifier, la figure 5.25 trace le coefficient de triaxalité des contraintes après un calcul utilisant la procédure d'équilibrage et la simulation de référence en champ complet.

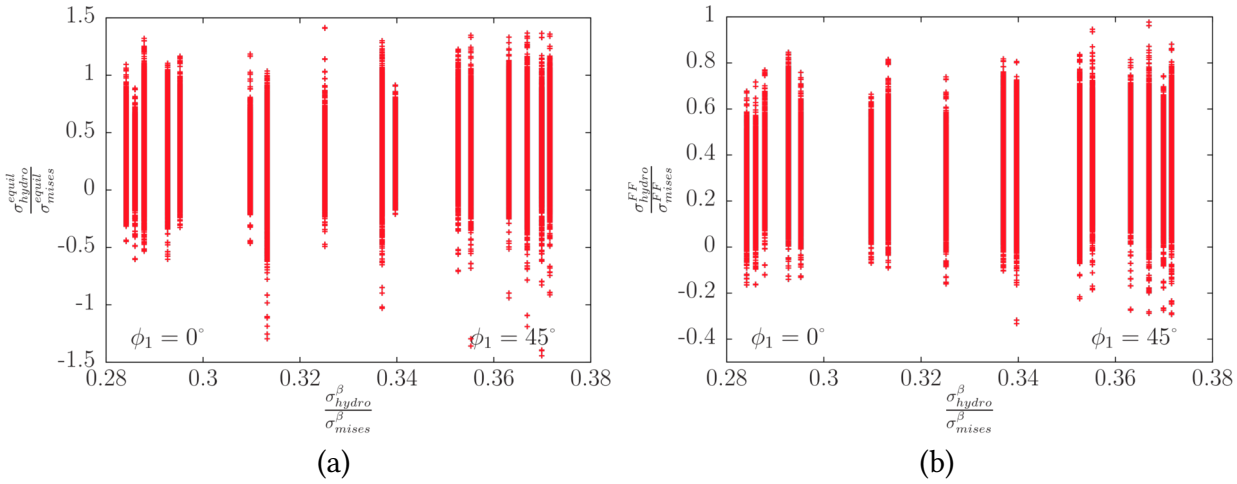


Figure 5.25 – *Graphe du coefficient de triaxalité par orientation cristallographique calculé à partir des estimations locales du modèle en β et comparé aux valeurs obtenus sur tous les points de Gauss pour : (a) la procédure de rééquilibrage sur un incrément de charge nulle et (b) pour la simulation en champ complet.*

Les valeurs obtenues pour le coefficient de triaxalité sont plus confinées vis-à-vis de l'équilibrage en déplacement. Elles sont encadrées par -0,5 et 1, ce qui n'est pas très loin de la simulation en champ complet. Ces premiers résultats illustrent l'impact de la variable utilisée durant l'incrément de rééquilibrage. Un maintien en charge permet de réduire les décharges élastiques locales et d'obtenir une redistribution des contraintes au sein de l'agrégat cohérente vis-à-vis de la simulation en champ complet.

Pour le moment, les résultats restent encore éloignés de la référence en champ complet. En réalité, l'algorithme reste très (trop) « libre », c'est-à-dire que les seules conditions imposées sont celles appliquées sur les bords de l'agrégat. Il y a de nombreuses possibilités pour résoudre les conditions de continuité du déplacement aux joints de grains ($e.g.$ des contraintes axiales principales nulles ou négatives dans le paragraphe précédent). Augmenter les possibilités de pilotage de l'algorithme de résolution, comme par exemple en imposant non pas une charge ou un déplacement mais la conservation d'une énergie ($e.g.$ le produit $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}$ de **Neuber** [Neuber, 1961]) pourrait améliorer la procédure. Le calcul d'équilibrage serait peut-être à même de reconstruire de manière encore plus précise une fluctuation intragranulaire à l'instant t. Ou alors, ne faudrait-il pas imposer que cette énergie soit conservée en moyenne au sein de chaque grain (pour ne pas avoir de valeurs erronées dans certaines zones) ? Avec des améliorations, la procédure pourrait servir sur des chargements cycliques, où les calculs sur un VER sont coûteux (en général, peu de cycles sont simulés) mais où la durée de vie en fatigue est très dépendante des valeurs locales aux joints de grains. Une solution serait alors de calculer un grand nombre de cycles avec un modèle en champ moyen sur un élément de volume (un point de **Gauss**). Puis, la procédure de localisation et d'équilibrage serait appliquée pour

reconstruire une fluctuation locale simplifiée de toutes les variables. L'ensemble de ces procédures constituent des perspectives prolongeant le travail prévu dans notre étude. N'oublions pas de plus que l'effet local d'histoire n'est pas pris en compte pour le moment, puisque le modèle en champ moyen traite des interactions intergranulaires, uniquement dans un cadre dit « parfaitement désordonné », à partir du jeu de variables internes phénoménologiques $\underset{\sim}{\beta}^g$ au cours des cycles.

Application de la méthode sur une structure

L'endommagement et la rupture des structures sont des phénomènes dont le développement initial est lié à des variables de l'échelle locale. Pour construire un modèle permettant de prévoir convenablement les zones critiques d'amorçage, il est donc nécessaire de pouvoir caractériser l'état du matériau en tout point géométrique (contraintes, déformations plastiques, ...) à cette échelle. C'est pourquoi l'idée de pouvoir reconstruire les champs locaux de toutes les « pièces virtuelles » en un instant du chargement à partir d'un seul calcul est intéressante, surtout que, pour les applications industrielles visées, les structures sont dimensionnées pour ne présenter qu'une déformation plastique très faible et localisée. Or la procédure d'équilibrage, avec un maintien du déplacement ou de la charge, conduit à une solution exacte des champs de la contrainte et de la déformation locale lorsque la structure se déforme de manière réversible (car le comportement est linéaire). C'est pour cela que nous avons souhaité développer une méthode de calcul accéléré, en supposant que le comportement du matériau est globalement élastique sauf au niveau de deux grains mal positionnés où nous souhaitons évaluer l'état du matériau sans devoir faire une simulation explicite complète (comme dans la partie 5.1 de ce chapitre). Nous avons donc testé la procédure sur une éprouvette cruciforme. Dans la suite, nous introduisons l'abréviation de « LBMF » pour « localised and balanced from a mean field model » et qui fait référence aux champs résultats obtenus à partir d'une simulation en champ moyen suivie d'une localisation des variables par phase cristallographique au sein du maillage d'une pièce virtuelle et enfin d'un équilibrage sur un incrément de chargement par un calcul en champ complet avec maintien de l'effort résultant. La figure 5.26 illustre la procédure qui pourrait être utilisée pour construire rapidement une base de données des réponses mécaniques locales de la structure en fonction des microstructures synthétiques appliquées.

L'idée consiste à évaluer rapidement si une pièce, de par sa microstructure, va développer une déformation plastique importante sans refaire un calcul complet. On pourrait également appliquer un modèle de durée de vie sur les champs équilibrés. Par rapport à l'exemple du volume élémentaire, les variables du modèle en champ moyen ne sont plus homogènes dans la structure (nous avons discuté de ce point dans la partie 5.1.1 de ce chapitre). Ainsi s'ajoute dans la procédure d'équilibrage, un phénomène local supplémentaire dont il faut tenir compte : la fluctuation locale de la réponse induite par le couplage entre le gradient de contraintes issu de la structure et les incompatibilités microstructurales. Nous proposons d'appliquer la méthode d'équilibrage à la fin du trajet de chargement représentant une traction biaxiale proportionnelle (en détail dans le paragraphe 5.1.2). La force calculée avec le modèle en champ moyen en fin de chargement est de $121{,}99\,\mathrm{kN}$ sur l'axe longitudinal et de $145{,}36\,\mathrm{kN}$ sur l'axe transverse. Pour simuler le maintien, une charge de $122{,}00\,\mathrm{kN}$ est appliquée dans la direction longitudinale et une de $145{,}37\,\mathrm{kN}$ dans la direction transverse, ce qui correspond à un incrément négligeable devant les valeurs finales obtenues précédemment. La vitesse de chargement est prise équivalente à la vitesse imposée en déplacement durant le calcul en champ moyen. Les figures 5.27, 5.28 et 5.29 illustrent les champs résultant de la procédure d'équilibrage sur un incrément de charge pour la composante transverse du tenseur des déformations totales, la

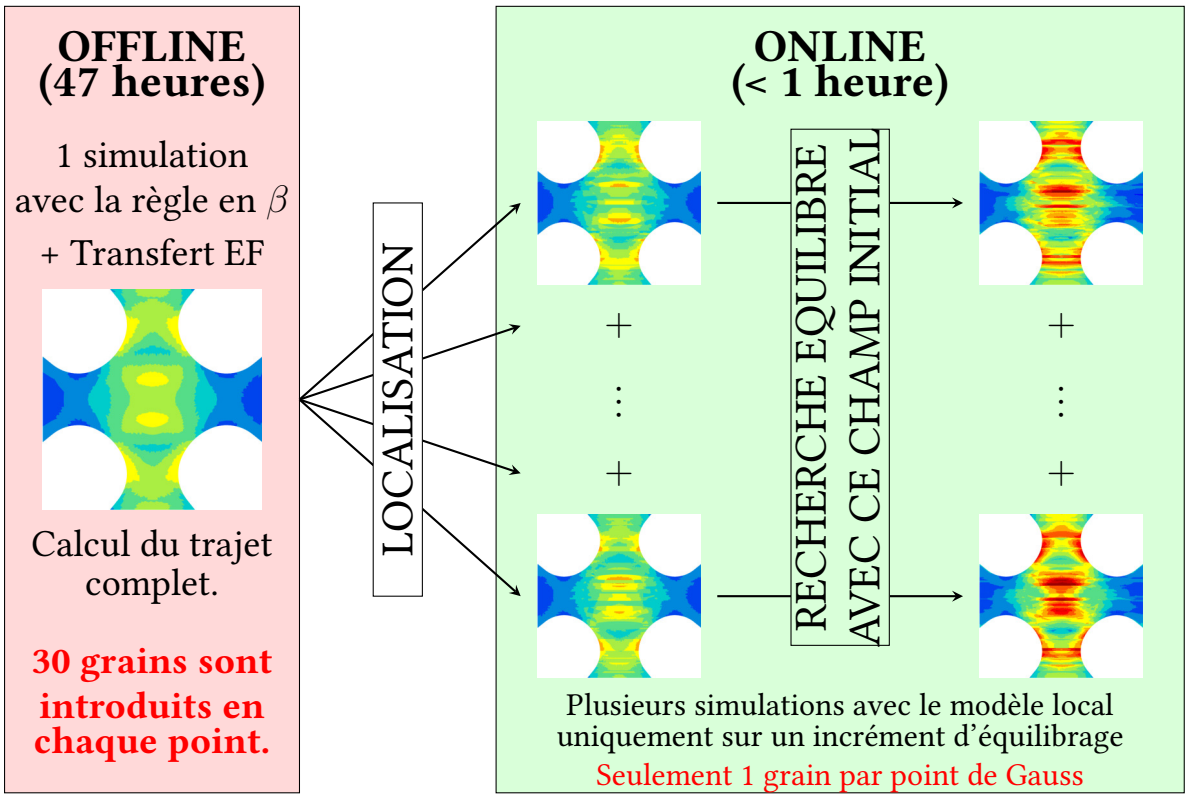


Figure 5.26 – *Schéma synthétisant l'approche idéale permettant la construction d'une base de données des réponses mécaniques d'une structure 3D en DS200+Hf avec une microstructure oligogranulaire synthétique et issu d'un seul calcul par éléments finis initial.*

contrainte équivalente de **von Mises** et la somme des intensités de glissement. Chaque résultat est comparé à la solution obtenue avec un calcul en champ complet classique pour deux réalisations où seul le jeu d'orientations cristallographiques est modifié.

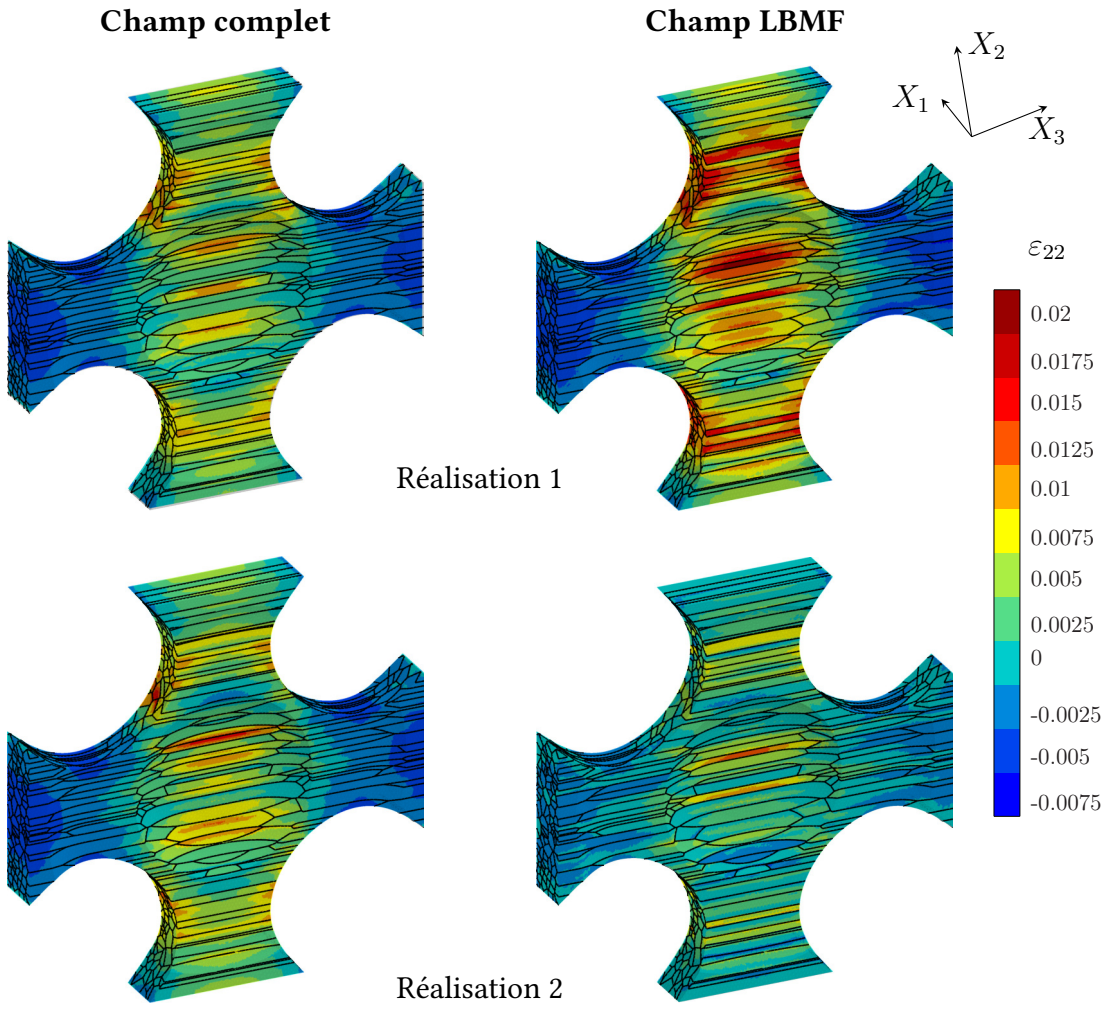


Figure 5.27 – *Comparaison de la composante transverse ε_{22} du tenseur des déformations pour la règle en β après lancement de la procédure de localisation puis d'équilibrage en charge pour 2 réalisations en champ complet.*

Les différents résultats présentés montrent l'effet de la procédure d'équilibrage. Les fluctuations intergranulaires, qui ont été étudiées précédemment en utilisant uniquement l'étape de localisation, sont enrichies par des phénomènes locaux d'incompatibilité aux joints. Les valeurs élevées de la déformation transverse à proximité des joints de grains, qui ont pu être mises en lumière dans le paragraphe 5.1.2, sont retrouvées dans certaines zones sur les résultats LBMF (Fig. 5.27). Toutefois, nous observons que la déformation transverse est globalement plus faible pour la réalisation 2 et plus forte pour la réalisation 1 par rapport aux prévisions des calculs en champ complet associés, en particulier dans la zone évidée de l'éprouvette en croix. A l'inverse, les valeurs de la contrainte équivalente de **von Mises** (Fig. 5.28) sont globalement plus élevées sur les isocontours LBMF quelle que soit la réalisation étudiée. De même, l'écoulement plastique a très peu évolué durant l'étape d'équilibrage en charge (Fig. 5.29). Ce point est confirmé par l'observation de la déformation plastique cumulée sur l'incrément d'équilibre, qui n'évolue pratiquement pas.

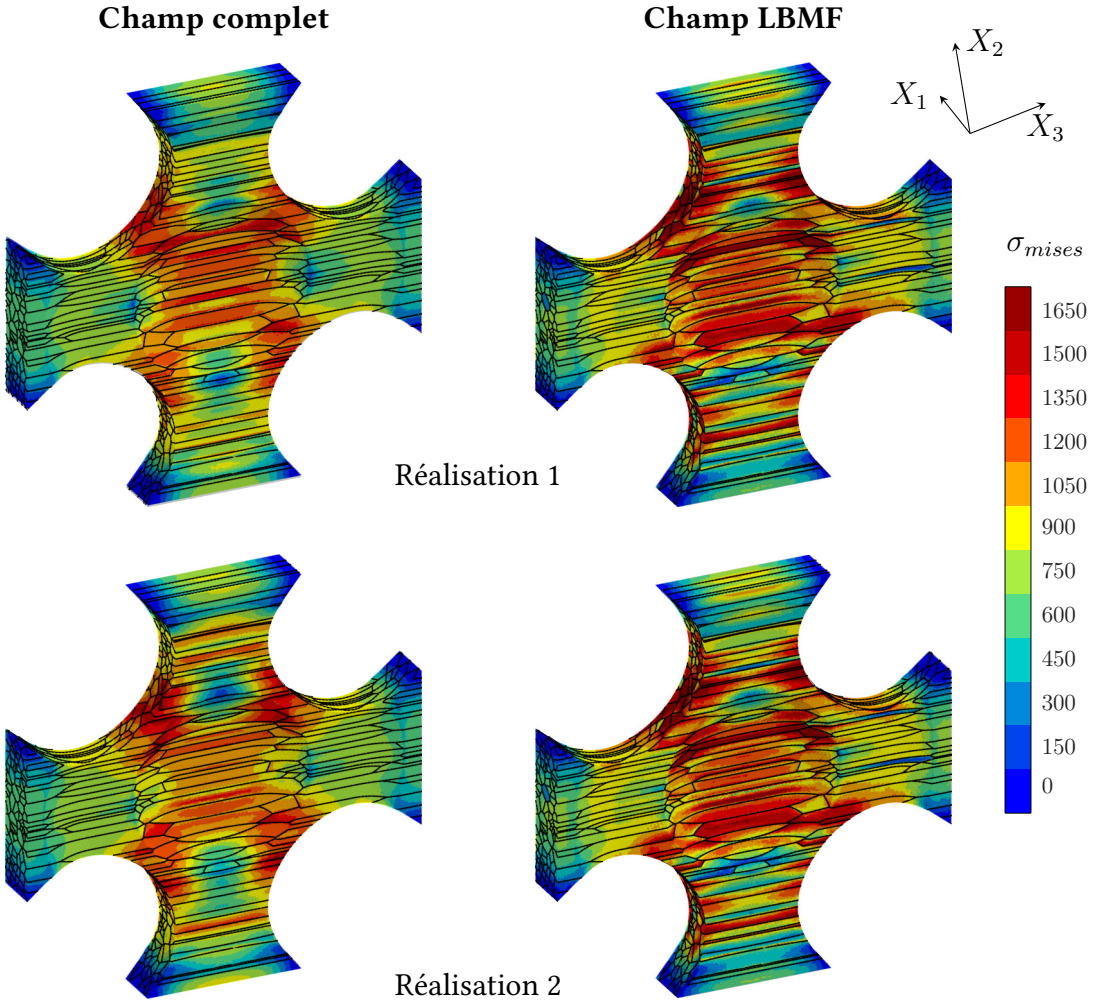


Figure 5.28 – *Comparaison de la contrainte équivalente de* **von Mises** σ_{mises} *pour la règle en* β *après lancement de la procédure de localisation puis d'équilibrage en charge pour 2 réalisations.*

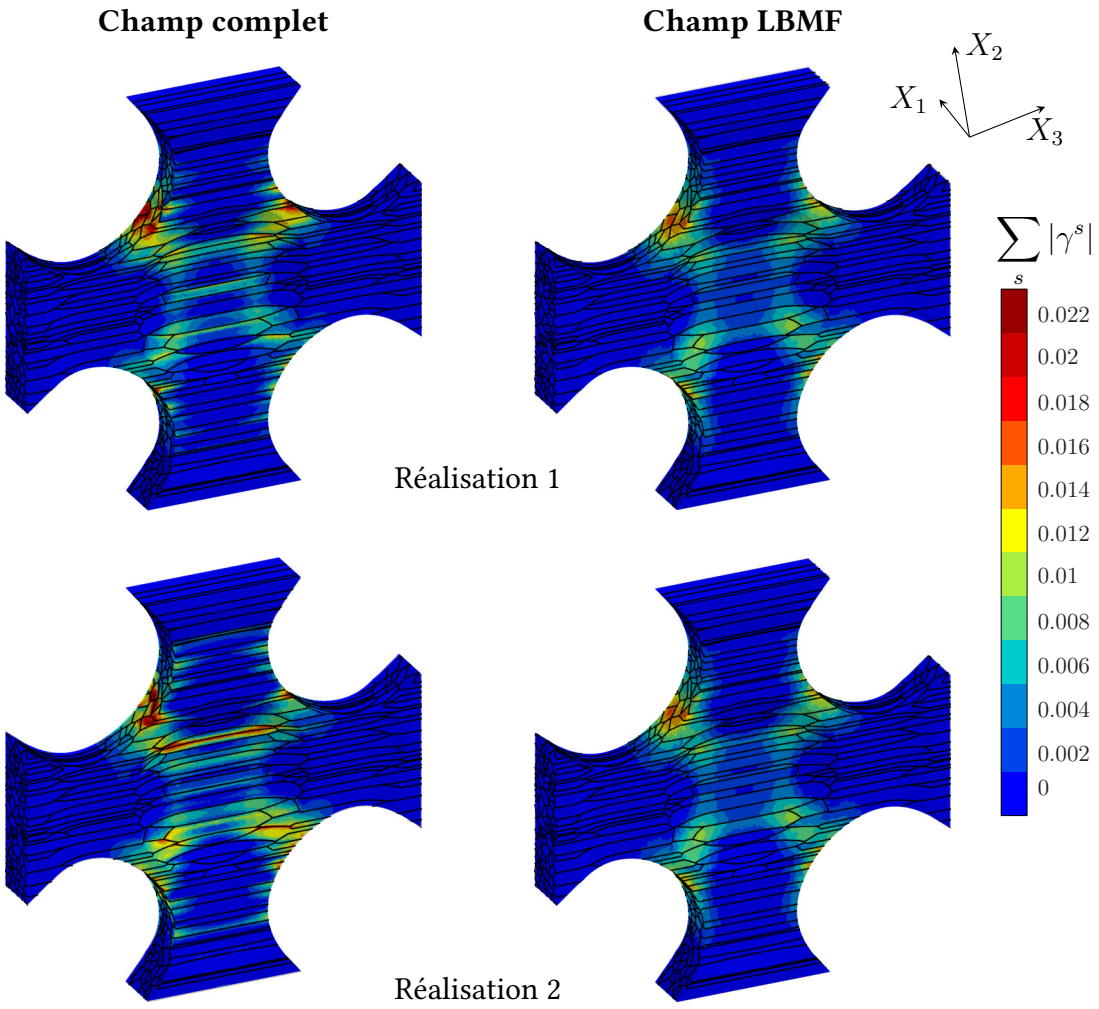


Figure 5.29 – *Comparaison de la somme des intensités de glissement* $\sum_s |\gamma^s|$ *pour la règle en* β *après lancement de la procédure de localisation puis d'équilibrage en charge pour 2 réalisations.*

Finalement, nous retrouvons le même phénomène que durant la tentative d'équilibrage en utilisant un incrément de déplacement réalisée sur le volume élémentaire (pas de déformation plastique durant le calcul d'équilibrage). Pourtant, les valeurs de la contrainte sur les champs LBMF restent élevées par rapport à la référence, ce qui n'était pas le cas sur l'agrégat DS. L'algorithme semble donc maintenir la charge. A noter également, la grande différence observée sur la composante transverse du tenseur des déformations pour les deux réalisations. Les défauts de la procédure semblent issus de l'aspect oligogranulaire de la structure. En effet, seuls quelques grains situés à proximité de la zone évidée pilotent la réponse macroscopique de la pièce. En fin de chargement, la force calculée en utilisant la règle en β est différente de la valeur obtenue pour chaque calcul en champ complet sur une pièce virtuelle, et elle varie d'un calcul en champ complet à l'autre (voir la figure 5.30).

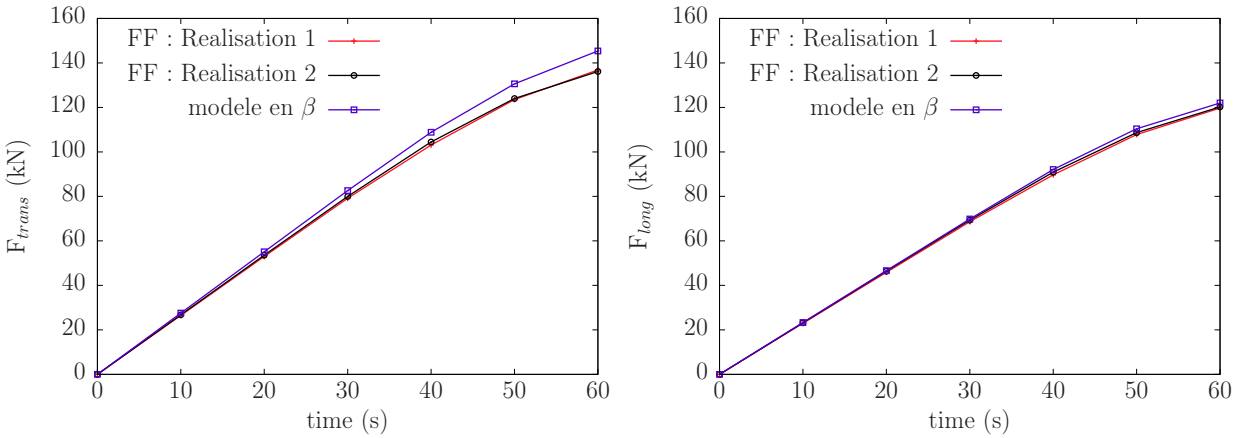


Figure 5.30 – *Réponse force/déplacement sur (a) l'axe transverse et (b) l'axe longitudinal pour le calcul avec la règle en β et les deux réalisations en champ complet.*

Cela n'était pas le cas sur l'agrégat DS car le volume contenait suffisamment de grains pour que la réponse macroscopique soit représentative. Donc lorsque l'incrément d'équilibrage est pris de $10\,\mathrm{N}$, il s'agit d'un incrément faible par rapport à la force calculée en fin de chargement avec la règle en β sur un maillage homogène mais qui peut être grand si la microstructure de la pièce étudiée possède des grains « mous » dans la zone utile, ou petit si à l'inverse la pièce est constituée de grains « durs ». Dans ce dernier cas, le calcul d'équilibrage devrait même conduire à une décharge élastique des grains. Pour améliorer les résultats LBMF, il faut réaliser la procédure plus tôt, par exemple pour un déplacement de $350\,\mu\mathrm{m}$ sur les deux axes de traction, puis finir le calcul en champ complet jusqu'à $400\,\mu\mathrm{m}$ ou $120\,\mathrm{kN}$. Ou alors, il ne faut pas changer de variable de pilotage, c'est-à-dire maintenir le déplacement final puisqu'il est commun à toutes les modélisations entreprises. Pour conclure, des progrès sont encore nécessaires pour atteindre une précision convenable durant l'étape d'équilibrage. Mentionnons tout de même que la déformation plastique n'est pas négligeable dans ce test. Il serait intéressant de voir les résultats que nous obtiendrions si la procédure était appliquée sur un cas métier : une aube de turbine soumise à un gradient thermique, une force centrifuge et des pressions aéronautiques. Le chargement est alors majoritairement longitudinal, sauf dans quelques zones où celui-ci est multi-axial, et où une déformation plastique peut se développer pour certaines configurations cristallographiques.

CONCLUSION ET PERSPECTIVES

Enjeux industriels

Avec une croissance exponentielle de l'utilisation des aubes de turbines en DS200+Hf, la connaissance approfondie de cet alliage devient un levier économique majeur pour Safran dans la production du moteur *Leap*. Quel est le niveau de désorientation primaire des grains admissible ? Faut-il conserver un joint de grains débouchant sur le bord d'attaque de la pale d'une aube de turbine ? A partir de combien de grains visibles en surface du profil la structure peut-elle être jugée conforme ? Voici une liste non exhaustive de questions que les ingénieurs se posent pour établir les critères qualité des pièces en DS200+Hf. La plupart de ces critères concernent la texture cristallographique originale du matériau, composée de « gros grains » colonnaires visibles à l'œil nu et dont on ne maîtrise pas complètement l'orientation cristallographique (primaire et secondaire), la morphologie et la répartition dans la pièce. Les valeurs données à ces critères sont souvent empiriques, basées sur des expériences précédentes ou bien issues d'hypothèses faites sur les mécanismes physiques en jeu. Au cours de cette étude, nous avons introduit la texture cristallographique particulière du matériau DS200+Hf dans la modélisation numérique, avec la volonté de remonter jusqu'à l'application sur des pièces réelles. Suivant cette idée, un premier objectif a consisté à construire un modèle mécanique homogène prédictif pour ce type d'alliage, permettant de dimensionner les pièces au niveau du bureau d'étude. Dans un second temps, nous avons montré les limites d'une telle approche sur des éprouvettes « en croix ». Nous proposons alors des outils numériques afin d'aider les ingénieurs à évaluer/étudier plus finement les structures. En particulier, le recours à un lot de pièces virtuelles permet d'étudier *a priori* la dispersion de la réponse mécanique en fonction de la microstructure pour un chargement et une géométrie fixés. Il sera également possible d'insérer des défauts, constatés lors de la production, afin d'évaluer leur niveau de criticité. Les différentes étapes qui nous ont permis d'arriver à ces propositions sont maintenant rappelées et commentées.

Les conclusions sur les travaux

Définition d'une échelle locale pour le matériau DS200+Hf

La première étape a consisté à définir des relations entre la contrainte et la déformation à l'échelle d'un monograin de DS200+Hf. Nous nous sommes orientés vers des modèles macroscopiques simples à cette échelle, issus du formalisme général de la plasticité cristalline et tenant compte des phénomènes plus locaux de durcissement par des lois d'écrouissage phénoménologiques. L'identification du modèle à deux températures, $650\,°C$ et $900\,°C$, s'est largement appuyée sur les données expérimentales issues de la thèse partenaire de **Mataveli Suave** réalisée à l'institut Pprime [Mataveli Suave, 2017].

Des approches ascendantes pour obtenir le comportement d'un agrégat cristallin DS

Une fois l'échelle locale du problème micromécanique définie, il est possible d'amorcer la démarche ascendante permettant de dégager un comportement mécanique de l'agrégat polycristallin à solidification dirigée (DS). Trois niveaux de modélisation ont été illustrés, introduisant plus ou moins d'informations statistiques sur le matériau. (i) L'approche en champ complet requiert un maillage explicite de la microstructure granulaire pour ensuite assigner une orientation cristallographique à chaque groupe d'éléments (grain). Sous réserve que l'étude soit réalisée sur un volume de matière synthétique suffisamment grand pour être représentatif (plusieurs aspects de cette notion ont été discutés), la modélisation offre en sortie une réponse locale différente en chaque point, qui dépend du milieu environnant. Par exemple, nous avons montré sur une microstructure en damier que la connaissance des voisins directs ne suffisait pas pour caractériser la réponse locale élastique en chaque point (le nuage de points après l'opération de tri est encore trop dispersé) : la zone qui définit le milieu environnant doit être bien plus étendue. (ii) L'approche macroscopique consiste à établir des lois entre la contrainte et la déformation à l'échelle de l'agrégat sans tenir compte des échelles inférieures. Pour les alliages DS, l'hypothèse principale est la symétrie isotrope transverse du matériau, insérée à la fois dans la définition du domaine d'élasticité initial et/ou son évolution durant l'écoulement plastique. (iii) L'approche en champ moyen est une solution intermédiaire, simplifiant le problème du milieu hétérogène afin d'extraire des lois analytiques de localisation et d'homogénéisation. Ainsi, le chargement global exercé sur l'agrégat est localisé à l'échelle de « phases cristallographiques » où les lois constitutives d'un monograin DS200+Hf précédemment définies sont appliquées et permettent d'estimer une réponse locale. Les réponses de chaque phase sont ensuite homogénéisées afin de reconstruire celle, globale, de l'agrégat.

Développement et analyse d'un modèle à champ moyen

C'est sur ces dernières approches que nous avons focalisé notre étude. Après avoir introduit succinctement les principaux développements disponibles dans la littérature, le choix s'est porté sur une adaptation de la règle en β aux matériaux contenant une hétérogénéité du comportement local à la fois dans le domaine élastique et lors de l'écoulement plastique. Ces développements sont d'autant plus importants que le coefficient d'anisotropie cubique pour le tenseur d'élasticité local est élevé sur les superalliages base nickel (proche de $2{,}8$ à température ambiante) et que le matériau se déforme peu plastiquement dans la direction transverse. Les phénomènes « aux temps courts » ne sont alors pas négligeables. Pour l'approche choisie (règle en β), une phase d'identification est requise, afin d'ajuster l'évolution du jeu de variables internes phénoménologiques, avant l'utilisation du modèle. Pour le cas des alliages DS, nous avons montré que cette étape ne pose pas de problème dans la mesure où le comportement mécanique d'un monograin est facilement accessible (soit par des essais sur une version monocristalline de l'alliage ou des chargements dans la direction longitudinale de l'agrégat DS). Le tenseur d'accommodation $\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}^g$ reste donc le seul paramètre à identifier sur les essais dans la direction transverse de l'alliage DS. Nous nous sommes basés sur des calculs en champ complet pour deux chargements élémentaires de traction simple et de cisaillement pur dans la direction transverse. Une analyse des réponses globales ($i.e.$ moyennées sur tout le volume) et locales ($i.e.$ moyennées par orientation cristallographique) permet ce recalage de l'évolution des variables $\boldsymbol{\beta}^g$. Enfin, la réponse du modèle a été analysée sur des chargements plus complexes cycliques et biaxiaux, par rapport aux résultats par éléments finis, voire en comparaison avec d'autres modèles micromécaniques en champ moyen. Dans le cadre de cette étude, nous avons montré que cette « loi d'homogénéisation » allie rapidité et simplicité de résolution is-

sues des premiers modèles à champ moyen avec la précision de modèles plus complexes de la littérature.

Confrontation essai/calcul à différents niveaux

Pour compléter l'étude, les essais de traction uniaxiale sollicitant le matériau dans la direction transverse des grains, réalisés par **Mataveli Suave** à l'institut Pprime, ont été confrontés aux prévisions du modèle. Aux deux températures, $650\,°C$ et $900\,°C$, les réponses du modèle sont en bon accord avec l'expérience et cela sans recalage des paramètres. Nous avons également mené un essai biaxial sur une éprouvette cruciforme en DS200+Hf. Les prévisions du modèle ont été à nouveau validées vis-à-vis des réponses globales expérimentales (forces/déplacements) pour différents rapports de charge sur les directions longitudinale et transverse de l'alliage. Des mesures de champs de déplacement obtenues par corrélation d'images ont permis de mettre en exergue une fluctuation de la composante transverse du tenseur des déformations dans la zone utile. Avec la résolution spatiale donnée par le montage expérimental (caméra, mouchetis, ...), nous avons remarqué que cette dispersion pouvait en partie être bornée par les estimations locales du modèle.

Vers la recherche de configurations cristallographiques critiques dans une structure oligogranulaire

Pour aller plus loin, nous avons proposé un chapitre d'ouverture sur le dimensionnement de pièces oligogranulaires. En effet, le constat est que pour les pièces étudiées (éprouvettes cruciformes et aubes de turbines), il n'est pas raisonnable d'utiliser des lois de comportement homogènes puisque la taille réelle des grains est grande devant les dimensions des structures en DS200+Hf (la séparabilité des échelles n'est pas assurée). Un outil permettant d'introduire une texture « 2D extrudée » dans une géométrie tridimensionnelle complexe a été proposé. Il est interfacé avec le logiciel commercial ANSYS. Nous avons été en mesure d'étudier les fluctuations locales de la réponse mécanique en fonction des quelques grains présents dans la zone évidée de l'éprouvette « en croix ». Des cartographies de la moyenne et de l'écart-type pour différentes variables ont été construites pour un lot de pièces virtuelles. Les résultats montrent que les dispersions peuvent atteindre plusieurs fois la valeur moyenne, ce qui montre bien que nous sortons du cadre de l'homogénéisation. Enfin, nous avons proposé une solution originale qui consiste à démarrer la modélisation de la structure par un calcul en champ moyen puis, à l'instant où les champs locaux sont recherchés, à appliquer une procédure de « transfert/localisation/équilibrage » afin de recréer des fluctuations inter- et intragranulaires. Nous avons montré les limites de l'approche sur un polycristal DS et sur l'éprouvette cruciforme telle qu'elle est utilisée et nous avons proposé des pistes pouvant améliorer les résultats.

Les livrables pour Safran

Pour le groupe Safran, les résultats obtenus durant cette thèse amènent à deux types d'action.

Enrichir les modèles mécaniques pour le bureau d'étude

Le modèle mécanique multi-échelle que nous proposons est déjà implémenté dans le code de calcul Zset et utilise une résolution explicite (méthode de Runge Kutta). Le code est encore

à l'état de prototype et devra être optimisé en termes de stockage des variables, opérations réalisées,... avant une utilisation industrielle. Les temps de calcul et la mémoire requise peuvent être réduits. Ensuite, il faut rajouter la partie « anisotherme » au modèle, c'est-à-dire introduire une partie de la déformation induite par la thermique. Cette introduction n'est pas complexe puisque le coefficient de dilatation thermique est isotrope, si bien que la déformation thermique locale est égale à la déformation thermique globale. Il est également nécessaire d'évaluer le tenseur $\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}^g$ à toutes les températures. Ce paramètre, permettant un recalage de l'accommodation plastique intergranulaire, ne pourra pas varier de manière significative afin de ne pas recréer des aberrations numériques similaires à celles obtenues si le paramètre d de l'écrouissage cinématique à l'échelle locale évolue fortement avec la température [Cailletaud et al., 2015]. Une fois le modèle « prêt à l'emploi », il faut évaluer la valeur ajoutée apportée par ce modèle pour le calcul de pièces. Nous avons montré la complexité du comportement de l'alliage étudié dans le cadre de ce travail. Il se situe à l'intermédiaire entre le comportement macroscopiquement isotrope des alliages conventionnels et le comportement d'un monograin où la déformation inélastique est régie par des phénomènes plus locaux de glissement. Il semble donc crucial de retranscrire les anisotropies générées par les interactions couplées aux différentes échelles : texture colonnaire, orientations cristallographiques spécifiques, systèmes de glissement.

Assister la construction de critères qualité robustes

Lorsque la mise en données des calculs sur pièces évolue peu (étapes finales du dimensionnement), une autre tâche consiste à évaluer l'impact de certains défauts supposés critiques en production. Grâce à la méthode d'introduction de la microstructure dans la géométrie et le modèle de plasticité cristalline proposés, la porte est ouverte à de nombreuses études de sensibilité. Des observations macroscopiques de la microstructure sur des aubes de turbines réelles permettraient de vérifier la cohérence des maillages générées (taille et forme des grains). Si c'est le cas, il est possible de juger de l'effet obtenu sur la dispersion des champs mécaniques en fonction du nombre de grains et de mettre en regard les critères de production sur ce sujet. A cela peuvent s'ajouter des études sur la désorientation primaire cristallographique pour chaque grain. Par exemple, des premiers résultats montrent qu'un grain avec une désorientation cristallographique de $60°$ située en bord d'attaque entraîne des contraintes supérieures aux seuils admissibles au niveau du raccord pale/pied [Coudon et al., 2017]. Pour introduire la désorientation géométrique (croissance des grains « en éventail »), des développements numériques sont nécessaires et de nouvelles observations doivent être menées pour quantifier le phénomène expérimentalement. Enfin, d'autres types de défauts ponctuels comme un joint de grains en escalier, un grain recristallisé,... pourraient être introduits dans le calcul.

Et pour la suite

Plus de calculs en champ complet

Finalement, pour étudier l'impact de la microstructure sur les champs locaux, la solution proposée consiste à réaliser un grand nombre de calculs en champ complet afin de construire une base de données des réponses possibles sous un chargement donné. Les développements récents sur le calcul massivement parallèle permettent d'obtenir le résultat de la simulation dans un temps toujours plus court, rendant l'étude de sensibilité à la microstructure possible sur des cas réels ($e.g.$ les développements récents dans le code Zset de **Parret-Fréaud** à Safran Tech [Parret-Fréaud et al., 2017]). Deux études sont alors possibles :

Définir ce qui est critique Maintenant que nous avons inséré la microstructure dans le calcul du comportement d'une structure, il faut réévaluer la manière dont on la dimensionne. Les contraintes sont naturellement plus élevées en certains points, à cause de l'hétérogénéité introduite. Alors qu'une modélisation associée à une loi de comportement homogène assure que la contrainte ne dépasse pas une valeur seuil donnée, il est difficile d'arriver à un résultat de ce type avec une modélisation en champ complet. Or la plupart des essais sont faits sur des barreaux polycristallins DS où, par exemple, la contrainte à rupture mesurée est une donnée macroscopique. Maintenant que nous avons décrit la structure jusqu'à l'échelle des grains, on ne peut plus se contenter d'utiliser des seuils macroscopiques. Il faut au contraire reformuler le modèle de prévision de durée de vie à une échelle cohérente avec les estimations du comportement, ce qui revient à l'exprimer sur la base d'un endommagement du monograin ($e.g.$ dans [Kaminski, 2007] pour la durée de vie en fatigue) et d'un endommagement du joint de grains. Si le sens long ne pose pas de problème particulier en raison de la relative homogénéité constatée, le sens travers est plus complexe. Ainsi, **Mataveli Suave** [Mataveli Suave, 2017] a-t-elle montré que la rupture est intergranulaire et semble se localiser préférentiellement (à $750\,^{\circ}\mathrm{C}$), là où les systèmes de glissement activés dans les grains adjacents conduisent aux plus fortes incompatibilités (rotation du réseau différente d'un grain à l'autre). Mailler finement à proximité des joints de grains et faire un calcul de comportement semble donc être la première étape à mettre en place dans l'objectif de construire des modèles de durée de vie plus physiques. D'autres effets devront également être introduits comme l'oxydation des joints en surface, puisque l'effet de ce phénomène sur le temps à rupture en fluage à haute température est très important ($e.g.$ dans [Mataveli Suave, 2017]). Et est-ce qu'à ce niveau de détails, la tortuosité des joints de grains sera encore négligeable ?

Se diriger vers des approches statistiques Une autre démarche consiste à traiter la dispersion de la réponse par des analyses statistiques, en caractérisant la distribution des valeurs obtenues sur un lot de pièces virtuelles. Nous avons effectué ce travail sur une éprouvette cruciforme pour un seul maillage et différents jeux d'orientations cristallographiques. Il est nécessaire de comparer également plusieurs maillages représentant plusieurs morphologies des grains dans la structure. La comparaison doit alors se faire sur un maillage dit « neutre » sur lequel tous les résultats en champ complet sont transférés. On peut étudier par exemple l'impact global qui serait lié à l'introduction d'une désorientation primaire cristallographique. Des questions comme les zones propices à une grande variabilité de la contrainte peuvent être abordées. Au-delà d'une caractérisation de la structure complète, il est possible de se focaliser sur une zone d'intérêt. Après avoir délimité cette fenêtre, par exemple la zone évidée au centre de l'éprouvette en croix, les données issues d'une série de calculs en champ complet peuvent être traitées. Il est alors possible de travailler sur les lois de distribution permettant de reproduire la densité de probabilité obtenue numériquement pour une variable donnée (déformation, contrainte, endommagement, ...). Il est également envisageable de travailler sur les valeurs extrêmes avec des outils associés telle que la loi de **Gumbel**. Cette loi devrait être recalée à partir d'une centaine de calculs afin, par la suite, de prévoir les valeurs maximales atteignables dans la zone d'intérêt avec des probabilités de l'ordre de 10^{-4} à 10^{-6}. Par exemple, il serait possible de tirer une probabilité d'atteindre un contrainte maximale admissible issue d'un abaque expérimental dans cette fenêtre d'intérêt.

Pour finir, il importe de réfléchir à l'accessibilité aux gros volumes de données nécessaires à ces études. Il peut être intéressant de trouver une méthode de calcul accéléré permettant de reconstruire la dispersion des champs mécaniques pour d'autres chargements, d'autres géométries et/ou d'autres zones d'intérêt sans refaire les calculs en champ complet. Il sera peut-être tout

numérique avec des méthodes issues du domaine de plus en plus populaire du « Big Data ». Ou peut-être faut-il chercher des approches couplant la mécanique au numérique ? C'est cette idée qui est défendue dans le dernier chapitre de cette thèse. Un premier calcul mécanique est réalisé pour obtenir les champs macroscopiques et des champs par phase cristallographique en tout point d'une structure homogène. Puis une méthode numérique doit permettre de faire la transition d'échelle entre la valeur d'une variable par phase cristallographique calculée en moyenne dans un volume élémentaire représentatif, et la valeur de la variable en un point géométrique d'un grain de la structure hétérogène. Il faut alors trouver la méthode numérique la moins coûteuse en temps et la plus précise par rapport à un calcul de référence entièrement calculé par une modélisation en champ complet. Souvent, les estimations obtenues par un modèle en champ moyen ne sont pas très dispersées, c'est-à-dire que sur les calculs d'agrégat, le nuage des réponses locales obtenues avec un modèle en champ moyen est bien plus petit que celui d'un calcul en champ complet. Le plus gros du travail est alors laissé à la partie numérique. Les méthodes du second ordre pourraient permettre d'élargir le nuage de points initial. Encore faut-il améliorer la procédure de localisation pour trouver une première valeur cohérente vis-à-vis de la distribution estimée par le modèle en champ moyen.

Une approche micromécanique plus riche

Vis-à-vis des développements récents trouvés dans la littérature, les choix de modélisation effectués peuvent paraître simples. Nous avons mis en avant l'aspect pratique du modèle, en introduisant des variables phénoménologiques à la fois pour traduire les phénomènes locaux de durcissement dans la loi de comportement d'un monograin DS200+Hf et globaux dans la loi de transition d'échelle. Ce modèle pourrait être limité dans la représentation des phénomènes physiques associés. Des voies d'amélioration sont proposées aux deux niveaux du modèle : le comportement d'un monograin, et la loi de transition d'échelles.

Comportement d'un monograin de DS200+Hf Les observations récentes effectuées par **Mataveli Suave** [Mataveli Suave, 2017] permettent de fixer les premières limites du modèle local utilisé. Premièrement, une dissymétrie du comportement viscoplastique en traction/compression est observée jusqu'à $800\,°\mathrm{C}$. Ce phénomène semble plus marqué lorsque le matériau est sollicité selon l'axe longitudinal. Cela expliquerait pourquoi cette dissymétrie n'a pas été observée durant les essais biaxiaux menés dans cette thèse (le chargement possédait une forte composante transverse). Cet effet s'introduit classiquement dans la loi de comportement à l'échelle locale, soit par une modification de la loi d'évolution de l'écrouissage cinématique, soit par l'utilisation de la contrainte normale au plan de glissement dans l'écoulement plastique. Egalement dans [Mataveli Suave, 2017], différents mécanismes physiques ont pu être observés lors d'essais en fatigue avec temps de maintien. Pour des temps de maintien longs ($\approx 300\,\mathrm{s}$), un vieillissement microstructural (mise en radeaux) est observé à $900\,°\mathrm{C}$, diminuant le nombre de cycles à rupture. Cette interaction de type fatigue/fluage pourrait être introduite (sous une forme d'endommagement ou directement dans la variable d'écrouissage). Enfin, un fluage primaire anormalement élevé est souvent observé à $750\,°\mathrm{C}$ pour une charge dépassant une valeur seuil ($530\,\mathrm{MPa}$ pour le CMSX-4 à $750\,°\mathrm{C}$ d'après [Rae and Reed, 2007]). Les auteurs montrent également que ce fluage primaire diminue pour une désorientation cristallographique par rapport à <001> plus importante. Le mécanisme qui semble piloter ce fluage primaire important est la capacité des dislocations à cisailler les précipités γ'. Cette température et ce seuil de contrainte constituent un point de fonctionnement possible dans les applications de Safran Helicopter Engines (qui souhaite utiliser également le DS200+Hf). Il faudra donc introduire ce

phénomène dans le modèle.

Loi de transition d'échelle S'il s'avérait que la règle en β ne suffit plus à prévoir la réponse mécanique de l'agrégat vis-à-vis d'expériences, numériques ou réelles, sur des trajets de chargement plus complexes, d'autres approches en champ moyen ont été proposées dans la littérature et pourraient être évaluées (par exemple le modèle à champ translaté avec une linéarisation viscoplastique affine récemment proposé dans [Mareau and Berbenni, 2015]). Dans notre recherche d'une dispersion simplifiée du champ de déformation et de contrainte au sein d'une structure, il peut également être intéressant d'étudier les modèles micromécaniques du second ordre qui, en plus de l'estimation d'une variable moyenne par phase cristallographique, donnent une estimation de la variance du champ local au sein de chacune des phases. Nous avons amorcé le calcul du second moment du tenseur des contraintes dans le cas purement élastique. Ce développement a été implémenté dans le code Zset. Il faut maintenant réaliser des tests supplémentaires à l'échelle de l'agrégat élastique pour vérifier que les estimations sont cohérentes avec les résultats de calculs par éléments finis. La technique pourrait ensuite être étendue à la viscoplasticité, sous réserve de conserver des lois de comportement simples à l'échelle locale (un choix est donc nécessaire). Ces estimations du second ordre peuvent alors être calculées dans une fenêtre d'intérêt de la structure où on cherche à connaître les fluctuations (le temps de calcul étant largement augmenté avec ces méthodes). Il est à noter toutefois que la fluctuation intra-phase obtenue reste associée à un problème où la séparabilité des échelles est vérifiée. Pour l'étude de structures oligogranulaires, les fluctuations « analytiques » estimées par l'approche du second ordre devraient être significativement différentes de celles obtenues en réalisant un grand nombre de calculs en champ complet. Cela reste à vérifier.

BIBLIOGRAPHIE

[Abdeljaoued et al., 2009] Abdeljaoued, D., Ben Naceur, I., Sai, K., and Cailletaud, G. (2009). A new polycrystalline plasticity model to improve ratchetting strain prediction. *Mechanics Research Communications*, 36 :309–315.

[Abdul-Latif et al., 1998] Abdul-Latif, A., Dingli, J.-P., and Saanouni, K. (1998). Modeling of complex cyclic inelasticity in heterogeneous polycrystalline microstructure. *Mech. of Materials*, 30 :287–305.

[Allison, 2011] Allison, J. (2011). Integrated Computational Materials Engineering : A Perspective on Progress and Future Steps. *JoM*, 63 :15–18.

[Anand and Kothari, 1996] Anand, L. and Kothari, M. (1996). A computational procedure for rate–independent crystal plasticity. *J. Mech. Phys. Sol.*, 44 :525–558.

[Arnoux, 2009] Arnoux, M. (2009). *Etude du comportement en fluage à haute température du superalliage monocristallin à base nickel MCNG : effet d'une surchauffe.* PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique.

[Asaro, 1983] Asaro, R. (1983). Crystal plasticity. *J. of Applied Mechanics*, 50 :921–934.

[Asaro and Needleman, 1985] Asaro, R. and Needleman, A. (1985). Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals. *Acta Metall.*, 33 :923–953.

[Ausias et al., 2007] Ausias, G., Thuillier, S., Omnès, B., Wiessner, S., and Pilvin, P. (2007). Micro-mechanical model of TPE made of polypropylene and rubber waste. *Polymer*, 48 :3367–3376.

[Badulescu et al.,] Badulescu, C., Lahellec, N., and Suquet, P. Field statistics in linear viscoelastic composites and polycrystals.

[Barbe et al., 2001a] Barbe, F., Decker, L., Jeulin, D., and Cailletaud, G. (2001a). Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part I : FE model. *Int. J. of Plasticity*, 17(4) :513–536.

[Barbe et al., 2000] Barbe, F., Forest, S., and Cailletaud, G. (2000). Polycrystalline plasticity under small strains : toward finer descriptions of microstructures. In Jeulin, D. and Bouchaud, E., editors, *Summer School on Physical Aspects of Fracture*, pages 191–206, Cargese, France. Kluwer.

[Barbe et al., 2001b] Barbe, F., Forest, S., and Cailletaud, G. (2001b). Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part II : Results. *Int. J. of Plasticity*, 17(4) :537–563.

[Barbe et al., 2003] Barbe, F., Forest, S., Quilici, S., and Cailletaud, G. (2003). Numerical study of crystalline plasticity : measurements of the heterogeneities due to grain boundaries under small strains. *Revue de Métallurgie*, 100 :815–823.

[Berbenni, 2002] Berbenni, S. (2002). *Elastoviscoplasticité des aciers polycristallins : modélisation micromécanique et physique, et applications au comportement dynamique et à l'effet bake hardening*. PhD thesis, Arts et Métiers ParisTech.

[Berthod and Conrath, 2016] Berthod, P. and Conrath, E. (2016). Creep and oxidation kinetics at 1100°C of nickel-base alloys reinforced by hafnium carbides. *Materials and Design*, 31 :27–36.

[Berveiller and Zaoui, 1979] Berveiller, M. and Zaoui, A. (1979). An extension of the self–consistent scheme to plastically flowing polycrystals. *J. Mech. Phys. Sol.*, 26 :325–344.

[Besson et al., 2001] Besson, J., Cailletaud, G., Chaboche, J.-L., and Forest, S. (2001). *Mécanique non linéaire des matériaux*. Hermès.

[Bishop and Hill, 1951] Bishop, J. and Hill, R. (1951). A theoretical derivation of the plastic properties of a polycrystalline face–centered metal. *Philosophical Magazine*, 42(334) :1298–1307.

[Brenner et al., 2009] Brenner, R., Lebensohn, R., and Castelnau, O. (2009). Elastic anisotropy and yield surface estimates of polycrystals. *Int. J. Sol. Structures*, 46 :3018–3026.

[Budianski and Wu, 1962] Budianski, B. and Wu, T. (1962). Theoretical prediction of plastic strains of polycrystals. In *Proc. 4th US Nat. Cong. Appl. Mech.*, pages 1175–1185.

[Buryachenko, 2007] Buryachenko, V. (2007). *Micromechanics of Heterogeneous Materials*. Springer.

[Busso and Cailletaud, 2005] Busso, E. and Cailletaud, G. (2005). On the selection of active slip systems in crystal plasticity. *Int. J. of Plasticity*, 21 :2212–2231.

[Busso and McClintock, 1996] Busso, E. and McClintock, F. (1996). A dislocation mechanics-based crystallographic model of a B2-type intermetallic alloy. *Int. J. of Plasticity*, 12 :1–28.

[Busso et al., 2000] Busso, E., Meissonnier, F., and O'Dowd, N. (2000). Gradient-dependent deformation of two-phase single crystals. *J. Mech. Phys. Sol.*, 48 :2333–2361.

[Cailletaud, 1987] Cailletaud, G. (1987). *Une approche micromécanique phénoménologique du comportement inélastique des métaux*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, Paris 6.

[Cailletaud and Coudon, 2016] Cailletaud, G. and Coudon, F. (2016). *Scale transition rules applied to crystal plasticity*, chapter In : Materials with internal structure : multiscale and multifield modeling and simulation (P. Trovalusci), pages 1–15. Springer.

[Cailletaud et al., 2003] Cailletaud, G., Forest, S., Jeulin, D., Feyel, F., Galliet, I., Mounoury, V., and Quilici, S. (2003). Some elements of microstructural mechanics. *Computational Materials Science*, 27 :351–374.

[Cailletaud and Pilvin, 1994] Cailletaud, G. and Pilvin, P. (1994). Utilisation de modèles polycristallins pour le calcul par éléments finis. *Revue Européenne des Éléments Finis*, 3 :515–541.

[Cailletaud et al., 2015] Cailletaud, G., Quilici, S., Azzouz, F., and Chaboche, J.-L. (2015). A dangerous use of the fading memory term for non linear kinematic models at variable temperature. *Eur. J. Mech., A/Solids*, 54 :24–29.

[Cailletaud and Sai, 2008] Cailletaud, G. and Sai, K. (2008). A polycrystalline model for the description of ratchetting : effect of intergranular and intragranular hardening. *Materials Science and Engineering A*, 480 :24–39.

[Chaboche, 2008] Chaboche, J. (2008). A review of some plasticity and viscoplasticity constitutive theories. *Int. J. of Plasticity*, 24 :1642–1693.

[Chaboche, 1989] Chaboche, J.-L. (1989). Constitutive equations for cyclic plasticity and cyclic viscoplasticity. *Int. J. of Plasticity*, 5 :247–302.

[Chiaruttini et al., 2010] Chiaruttini, V., Feyel, F., and Chaboche, J.-L. (2010). A robust meshing algorithm for complex 3D crack growth simulation. In 4^{th} *European Conference on Computational Mechanics*, Paris, France.

[Cormier and Cailletaud, 2010] Cormier, J. and Cailletaud, G. (2010). Constitutive modeling of the creep behavior of single crystal superalloys under non-isothermal conditions inducing phase transformations. *Materials Science and Engineering A*, 527 :6300–6312.

[Correlated Solutions, 2013] Correlated Solutions (2013). Notice technique du logiciel vic 2d.

[Coudon et al., 2017] Coudon, F., Gourdin, S., Marcin, L., and Cailletaud, G. (2017). Modélisation viscoplastique du comportement de structures oligogranulaires en alliages à solidification dirigée. In 13^{me} *Colloque National en Calcul des Structures (CSMA)*, Mai, Giens.

[Devincre et al.,] Devincre, B., Kubin, L., and Hoc, T. Physical analyses of crystal plasticity by DD simulations.

[Dingli et al., 2000] Dingli, J.-P., Abdul-Latif, A., and Saanouni, K. (2000). Predictions of the complex cyclic behavior of polycrystals using a self-consistent modeling. *Int. J. of Plasticity*, 16 :411–437.

[Doghri et al., 2010] Doghri, I., Adam, L., and Bilger, N. (2010). Mean-field homogenization of elasto-viscoplastic composites based on a general incrementally affine linearization method. *Int. J. of Plasticity*, 26 :219–238.

[Doghri et al., 2011] Doghri, I., Brassart, L., Adam, L., and Gérard, J.-S. (2011). A second-moment incremental formulation for the mean-field homogenization of elasto-plastic composites. *Int. J. of Plasticity*, 27 :352–371.

[Dong et al., 2014] Dong, C., Yang, X., Shi, D., and Yu, H. (2014). Modeling of anisotropic tensile and cyclic viscoplastic behavior of a nickel-base directionally solidified superalloy. *Materials and Design*, 55 :966–978.

[Duhl and Sullivan, 1971] Duhl, D. and Sullivan, C. (1971). Some effects of hafnium additions on the mechanical properties of a columnar-grained nickel-base superalloy. *JoM*, 23 :38–40.

[Dunne et al., 2007] Dunne, F., Wilkinson, A., and Allen, R. (2007). Experimental and computational studies of low cycle fatigue crack nucleation in a polycrystal. *Int. J. of Plasticity*, 23 :273–295.

[Dvorak, 1992] Dvorak, G. (1992). Transformation Field Analysis of Inelastic Composite Materials. *Proc. Royal Soc. London, A*, 437 :311–327.

[Dvorak et al., 1994] Dvorak, G., Bahei-El-Din, Y., and Wafa, A. (1994). Implementation of the transformation field analysis for inelastic composite materials. *Computational Mechanics*, 14 :201–228.

[Epishin et al., 2004] Epishin, A., Link, T., Bruckner, U., Fedelich, B., and Portella, P. (2004). *Effects of segregation in nickel-base superalloys : Dendritic stresses*, pages 537–543. TMS (Superalloys 2004).

[Eshelby, 1957] Eshelby, J. (1957). The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proc. Royal Soc. London*, 241 :376–396.

[Evrard, 2008] Evrard, P. (2008). *Modélisation polycristalline du comportement élastoplastique d'un acier inoxydable austéno-ferritique.* PhD thesis, Ecole Centrale Lille et Université nationale de Rosario.

[Faivre, 1971] Faivre, G. (1971). Hétérogénéités ellipsoïdales dans un milieu élastique anisotrope. *Le journal de Physique*, 32 :325–331.

[Feyel and Chaboche, 2000] Feyel, F. and Chaboche, J.-L. (2000). FE^2 multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC/Ti composite materials. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng*, 183 :309–330.

[Forest and Rubin, 2016] Forest, S. and Rubin, M. (2016). A rate-independent crystal plasticity model with a smooth elastic-plastic transition and no slip indeterminacy. *Eur. J. Mech., A/Solids*, 55 :278–288.

[François et al., 1993] François, D., Pineau, A., and Zaoui, A. (1993). *Comportement mécanique des matériaux. Volume 2 : endommagement, mécanique de la rupture, mécanique du contact.* Hermès.

[François et al., 1998] François, D., Pineau, A., and Zaoui, A. (1998). *Mechanical Behaviour of Materials.* Kluwer Academic Publishers.

[Franciosi, 1985] Franciosi, P. (1985). The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals. *Acta Metall.*, 33 :1601–1612.

[Franciosi et al., 1980] Franciosi, P., Berveiller, M., and Zaoui, A. (1980). Latent hardening in copper and aluminium single crystals. *Acta Metall.*, 28 :273–283.

[Frederick and Armstrong, 2007] Frederick, C. and Armstrong, P. (2007). A mathematical representation of the multiaxial Bauschinger effect. *Materials at High Temperatures*, 24(1) :1–26.

[Fritzen, 2010] Fritzen, F. (2010). *Microstructural modeling and computational homogenization of the physically linear and nonlinear constitutive behavior of micro-heterogeneous materials.* PhD thesis, Karlsruher Institut für Technologie.

[Gadaud, 2015] Gadaud, P. (2015). Communication interne : Mesure dynamique du module d'Young pour le DS200.

[Gambin, 1991] Gambin, W. (1991). Crystal plasticity based on yield surfaces with rounded-off corners. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 71 :T265–T268.

[Garat et al., 2008] Garat, V., Cloue, J.-M., Poquillon, D., and Andrieu, E. (2008). Influence of Portevin-Le Chatelier effect on rupture mode of alloy 718 specimens. *J. Nucl. Mat.*, 375 :95–101.

[Gaubert, 2009] Gaubert, A. (2009). *Modélisation des effets de l'évolution microstructurale sur le comportement mécanique du superalliage monocristallin AM1.* PhD thesis, École Nationale Supérieure des Mines de Paris.

[Gentieu, 2015] Gentieu, T. (2015). Evalutation numérique des relations de transition d'échelle pour les modèles à champ moyen. Master's thesis, PSL Research University, MINES ParisTech, Centre des Matériaux.

[Gérard et al.,] Gérard, C., Bacroix, B., Bornert, M., Cailletaud, G., Crépin, J., and Leclercq, S. Hardening description for FCC materials under complex loading paths. *Computational Materials Science*, 45 :751–755.

[Gérard et al., 2013] Gérard, C., Cailletaud, G., and Bacroix, B. (2013). Modeling of latent hardening produced by complex loading paths in FCC alloys. *Int. J. of Plasticity*, 42 :194–212.

[Ghosh et al., 2016] Ghosh, S., Weber, G., and Keshavarz, S. (2016). Multiscale modeling of polycrystalline nickel-based superalloys accounting for subgrain microstructures. *Mechanics Research Communications*, 78 :34–46.

[Giraud, 2014] Giraud, R. (2014). *Influence de l'histoire thermique sur les propriétés mécaniques à haute et très haute température du superalliage monocristallin CMSX-4.* PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique.

[Gourdin, 2016] Gourdin, S. (2016). Communication personnelle.

[Guilhem et al., 2013] Guilhem, Y., Basseville, S., Curtit, F., Stéphan, J.-M., and Cailletaud, G. (2013). Numerical investigations of the free surface effect in three-dimensional polycrystalline aggregates. *Computational Materials Science*, 70 :150–162.

[Hashin, 1969] Hashin, Z. (1969). The inelastic inclusion problem. *Int. J. of Engng Science*, 7 :11–36.

[Hershey, 1954] Hershey, A. (1954). The elasticity of an isotropic aggregate of anisotropic cubic crystals. *J. of Applied Mechanics*, 21 :236–240.

[Hild and Roux, 2011] Hild, F. and Roux, S. (2011). Techniques expérimentales : Corrélation d'images numériques. Cours de M2R MAGIS.

[Hill, 1965] Hill, R. (1965). Continuum micro–mechanics of elastoplastic polycrystals. *J. Mech. Phys. Sol.*, 13 :89–101.

[Hill, 1966] Hill, R. (1966). Generalized constitutive relations for incremental deformation of metal crystals by multislip. *J. Mech. Phys. Sol.*, 14 :95–102.

[Hutchinson, 1976] Hutchinson, J. (1976). Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. *Proc. Royal Soc. London*, A348 :101–127.

[Jeulin, 2012] Jeulin, D. (2012). Morphology and effective properties of multi-scale random sets : A review. *Comptes Rendus de Mécanique*, 340 :219–229.

[Kalidindi, 2012] Kalidindi, S. (2012). Computationally efficient, fully coupled multiscale modeling of materials phenomena using calibrated localization linkages. *ISRN Materials Science*, 305692 :13 p.

[Kaminski, 2007] Kaminski, M. (2007). *Modélisation de l'endommagement en fatigue des superalliages monocristallins pour aubes de turbines en zone de concentration de contrainte*. PhD thesis, Mines ParisTech.

[Kanit et al., 2003] Kanit, T., Forest, S., Galliet, I., Mounoury, V., and Jeulin, D. (2003). Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *Int. J. Sol. Structures*, 40 :3647–3679.

[Kocks and Brown, 1966] Kocks, U. and Brown, T. (1966). Latent hardening in aluminium. *Acta Metall.*, 14 :87–98.

[Kouddane et al., 1994] Kouddane, R., Zouhal, N., Molinari, A., and Canova, G. (1994). Complex loading of viscoplastic materials : micro-macro modelling. *Materials Science and Engineering*, A175 :31–36.

[Kröner, 1977] Kröner, E. (1977). Bounds for effective moduli of disordered materials. *J. Mech. Phys. Sol.*, 25 :137–155.

[Kröner, 1961] Kröner, E. (1961). Zur plastischen Verformung des Vielkristalls. *Acta Metall.*, 9 :155–161.

[Kröner, 1981] Kröner, E. (1981). Linear properties of random media- The systematic theory. In Huet, C. and Zaoui, A., editors, *Comportements rhéologiques et structure des matériaux*, pages 15–40, CR 15e Coll. GFR. Editions ENPC.

[Lahellec and Suquet, 2007a] Lahellec, N. and Suquet, P. (2007a). On the effective behavior of nonlinear inelastic composites : I. Incremental variational principles. *J. Mech. Phys. Sol.*, 55 :1932–1963.

[Lahellec and Suquet, 2007b] Lahellec, N. and Suquet, P. (2007b). On the effective behavior of nonlinear inelastic composites : II. A second-order procedure. *J. Mech. Phys. Sol.*, 55 :1964–1992.

[Landi et al., 2010] Landi, G., Niezgoda, S., and Kalidindi, S. (2010). Multi-scale modeling of elastic response of three-dimensional voxel-based microstructure datasets using novel DFT-based knowledge systems. *Acta Mat.*, 58 :2716–2725.

[Lantuéjoul, 1991] Lantuéjoul, C. (1991). Ergodicity and integral range. *J. Microsc.*, 161 :387–403.

[Lavergne et al., 2013] Lavergne, F., Brenner, R., and Sab, K. (2013). Effects of grain size distribution and stress heterogeneity on yield stress of polycrystals : A numerical approach. *Computational Materials Science*, 77 :387–398.

[Le Graverend et al., 2014] Le Graverend, J.-B., Cormier, J., Gallerneau, F., Villechaise, P., Kruch, S., and Mendez, J. (2014). A microstructure-sensitive constitutive modeling of the inelastic behavior of single crystal nickel-based superalloys at very high temperature. *Int. J. of Plasticity*, 59 :55–83.

[Lebensohn, 2001] Lebensohn, R. (2001). N-site modeling of a 3D viscoplastic polycrystal using Fast Fourier Transform. *Acta Mat.*, 49 :2723–2737.

[Lebensohn et al., 2011] Lebensohn, R., Ponte Castaneda, P., Brenner, R., and Castelnau, O. (2011). *Full-Field vs. Homogenization Methods to Predict Microstructure–Property Relations for Polycrystalline Materials*, chapter In : Computational Methods for Microstructure-Property Relationships (S. Ghosh and D. Dimiduk). Springer.

[Lebensohn and Tomé, 1994] Lebensohn, R. and Tomé, C. (1994). A self-consistent viscoplastic model–prediction of rolling textures of anisotropic polycrystals. *Materials Science and Engineering A*, 175 :71–82.

[Lebensohn and Tomé,] Lebensohn, R. and Tomé, C. N. A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals : application to zirconium alloys. *Acta Informatica.*

[Lemaitre and Chaboche, 1985] Lemaitre, J. and Chaboche, J.-L. (1985). *Mécanique des matériaux solides.* Dunod, Paris.

[Lin, 1957] Lin, T. (1957). Analysis of elastic and plastic strain in FCC crystal. *J. Mech. Phys. Sol.*, 5 :143–149.

[Liu and Ponte Castaneda, 2004a] Liu, Y. and Ponte Castaneda, P. (2004a). Homogenization estimates for the average behavior and field fluctuations in cubic and hexagonal viscoplastic polycrystals. *J. Mech. Phys. Sol.*, 52 :1175–1211.

[Liu and Ponte Castaneda, 2004b] Liu, Y. and Ponte Castaneda, P. (2004b). Second-order theory for the effective behavior and field fluctuations in viscoplastic polycrystals. *J. Mech. Phys. Sol.*, 52 :467–495.

[Ludwig et al., 2009] Ludwig, W., King, A., Reischig, P., Herbig, M., Lauridsen, E., Schmidt, S., Proudhon, H., Forest, S., Cloetens, P., du Roscoat, S. R., Buffière, J., Marrow, T., and Poulsen, H. (2009). New opportunities for 3D materials science of polycrystalline materials at the micrometre lengthscale by combined use of X-ray diffraction and X-ray imaging. *Materials Science and Engineering A*, 524 :69–76.

[Ma and Roters, 2004] Ma, A. and Roters, F. (2004). A constitutive model for FCC single crystals based on dislocation densities and its application to uniaxial compression of aluminum single crystals. *Acta Mat.*, 52 :3603–3612.

[Madec, 2001] Madec, M. (2001). *Des intersections entre dislocations à la plasticité du monocristal CFC : Etude par dynamique des dislocations.* PhD thesis, Université PARIS XI Orsay.

[Mandel, 1965] Mandel, J. (1965). Une généralisation de la théorie de la plasticité de W.T. Koiter. *Int. J. Sol. Structures*, 1 :273–295.

[Mandel, 1966] Mandel, J. (1966). *Contribution théorique à l'étude de l'écrouissage et des lois de l'écoulement plastique*, chapter In : Applied Mechanics : Proceedings of the Eleventh International Congress of Applied Mechanics Munich (Germany) 1964 (H. Görtler). Springer.

[Mandel, 1973] Mandel, J. (1973). Equations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques. *Int. J. Sol. Structures*, 9 :725–740.

[Mareau and Berbenni, 2015] Mareau, C. and Berbenni, S. (2015). An affine formulation for the self-consistent modeling of elasto-viscoplastic heterogeneous materials based on the translated field method. *Int. J. of Plasticity*, 64 :134–150.

[Martin, 2012] Martin, G. (2012). *Modélisation multi-échelles du comportement contrainte–déformation des alliages de titane beta-métastables*. PhD thesis, École Nationale Supérieure des Mines de Paris.

[Martin et al., 2014] Martin, G., Ochoa, N., Sai, K., Hervé-Luanco, E., and Cailletaud, G. (2014). A multiscale model for the elastoviscoplastic behavior of directionally solidified alloys : Application to FE structural computations. *Int. J. Sol. Structures*, 51 :1175–1187.

[Masson and Zaoui, 1999] Masson, R. and Zaoui, A. (1999). Self-consistent estimates for the rate-dependent elastoplastic behaviour of polycrystalline materials. *J. Mech. Phys. Sol.*, 47 :1543–1568.

[Mataveli Suave, 2017] Mataveli Suave, L. (2017). *Etude de la durée de vie à haute température de l'alliage DS200*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique.

[Mataveli Suave et al., 2016] Mataveli Suave, L., Cormier, J., Villechaise, P., Bertheau, D., Benoit, G., Cailletaud, G., and Marcin, L. (2016). Anisotropy in creep properties of DS200+Hf alloy. *Materials at High Temperatures*, 33 :361–371.

[Matheron, 1989] Matheron, G. (1989). *Estimating and Choosing*. Springer Verlag.

[Mazière et al., 2008] Mazière, M., Besson, J., Forest, S., Tanguy, B., Chalons, H., and Vogel, F. (2008). Numerical modelling of the portevin-le chatelier effect. *European Journal of Computational Mechanics*, 17 :761–772.

[Mazzoleni et al., 2015] Mazzoleni, P., Matta, F., Zappa, E., Sutton, M., and Cigada, A. (2015). Gaussian pre-filtering for uncertainty minimization in digital image correlation using numerically-designed speckle patterns. *Optics and Lasers in Engineering*, 66 :19–33.

[McDowell et al., 2011] McDowell, D., Ghosh, S., and Kalidindi, S. (2011). Representation and computational structure-property relations of random media. *JoM*, 63 :45–51.

[McDowell et al., 2010] McDowell, D., Panchal, J., Choi, H.-J., Conner Seepersad, C., Allen, J., and Mistree, F. (2010). *Integrated Design of Multiscale, Multifunctional Materials and Products*. Butterworth-Heinemann.

[McGinty, 2001] McGinty, R. (2001). *Multiscale representation of polycrystalline inelasticity*. PhD thesis, Georgia Tech.

[Méric and Cailletaud, 1991] Méric, L. and Cailletaud, G. (1991). Single crystal modeling for structural calculations. Part 2 : Finite element implementation. *J. of Engng. Mat. Technol.*, 113 :171–182.

[Méric et al., 1991] Méric, L., Poubanne, P., and Cailletaud, G. (1991). Single crystal modeling for structural calculations. Part 1 : Model presentation. *J. of Engng. Mat. Technol.*, 113 :162–170.

[Meunier, 2016] Meunier, F. (2016). Communication personnelle.

[Michel et al., 2001] Michel, J., Moulinec, H., and Suquet, P. (2001). A computational scheme for linear and non-linear composites with arbitrary phase contrast. *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 52 :139–160.

[Michel and Suquet, 2016] Michel, J. and Suquet, P. (2016). A model-reduction approach in micromechanics of materials preserving the variational structure of constitutive relations. *J. Mech. Phys. Sol.*, 90 :254–285.

[Michel and Suquet, 2009] Michel, J.-C. and Suquet, P. (2009). *Nonuniform transformation field analysis : a reduced model for multiscale nonlinear problems in solid mechanics*, chapter In : Multiscale Modelling in Solid Mechanics - Computational Approaches vol. 3 (U. Galvanetto and F. Aliabadi), pages 156–206. Imperial College Press, London.

[Milhet et al., 2012] Milhet, X., Arnoux, M., Cormier, J., Mendez, J., and Tromas, C. (2012). On the influence of the dendritic structure on the creep behavior of a Re-containing superalloy at high temperature/low stress. *Materials Science and Engineering A*, 546 :139–145.

[Molinari et al., 1997] Molinari, A., Ahzi, S., and Kouddane, R. (1997). On the self-consistent modeling of elastic-plastic behavior of polycrystals. *Mech. of Materials*, 26 :43–62.

[Molinari et al., 1987] Molinari, A., Canova, G., and Ahzi, S. (1987). A self–consistent approach to the large deformation polycrystal viscoplasticity. *Acta Metall.*, 35 :2983–2994.

[Montagnat et al., 2014] Montagnat, M., Castelnau, O., Bons, P., Faria, S., Gagliardini, O., Gillet-Chaulet, F., Grennerat, F., Griera, A., Lebensohn, R., Moulinec, H., Roessiger, J., and Suquet, P. (2014). Multiscale modeling of ice deformation behavior. *Journal of Structural Geology*, 61 :78–108.

[Moulinec and Suquet, 1998] Moulinec, H. and Suquet, P. (1998). A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng*, 157 :69–94.

[Mounoury, 2002] Mounoury, V. (2002). private communication.

[Mughrabi, 2014] Mughrabi, H. (2014). The importance of sign and magnitude of γ/γ' lattice misfit in superalloys - with special reference to the new γ'-hardened cobalt-base superalloys. *Acta Mat.*, 81 :21–29.

[Mura, 1987] Mura, T. (1987). *Micromechanics of defects in solids.* Martinus Nijhoff.

[Murakumo et al., 2004] Murakumo, T., Kobayashi, T., Koizumi, Y., and Harada, H. (2004). Creep behaviour of Ni-base single-crystal superalloys with various γ' volume fraction. *Acta Mat.*, 52 :3737–3744.

[Nemat-Nasser and Obata, 1986] Nemat-Nasser, S. and Obata, M. (1986). Rate-dependent, finite elasto-plastic deformation of polycrystals. *Proc. Royal Soc. London*, 407 :343–375.

[Neuber, 1961] Neuber, H. (1961). Theory of stress concentration for shear-strained prismatical bodies with arbitrary nonlinear stress-strain law. *J. of Applied Mechanics*, 28 :544–550.

[N'Guyen, 2014] N'Guyen, F. (2014). *Morphologie mathématique appliquée au développement d'outils de maillage EF automatiques dans le cas de microstructures hétérogènes bi et multiphasées.* PhD thesis, Université Lille 1 - Sciences et Technologies.

[Niezgoda et al., 2011] Niezgoda, S., Yabansu, Y., and Kalidindi, S. (2011). Understanding and visualizing microstructure and microstructure variance as a stochastic process. *Acta Mat.*, 59 :6387–6400.

[Nouailhas and Cailletaud, 1992] Nouailhas, D. and Cailletaud, G. (1992). Comparaison de divers critères anisotropes pour monocristaux cubiques à faces centrées (CFC). *C. R. Acad. Sci. Paris, Série II*, 315 :1573–1579.

[Osipov et al., 2006] Osipov, N., Gourgues-Lorenzon, A.-F., Cailletaud, G., Diard, O., and Marini, B. (2006). Generation and study of bainitic microstructures. In *Matériaux 2006*, Dijon, France.

[Osipov et al., 2008] Osipov, N., Gourgues-Lorenzon, A.-F., Marini, B., Mounoury, V., Nguyen, F., and Cailletaud, G. (2008). FE modelling of bainitic steels using crystal plasticity. *Philosophical Magazine*, 88 :3757–3777.

[Panchal et al., 2013] Panchal, J., Kalidindi, S., and McDowell, D. (2013). Key computational modeling issues in Integrated Computational Materials Engineering. *Computer-Aided Design*, 45 :4–25.

[Paquin et al., 2001] Paquin, A., Berbenni, S., Favier, V., Lemoine, X., and Berveiller, M. (2001). Micromechanical modeling of the elastic-viscoplastic behavior of polycrystalline steels. *Int. J. of Plasticity*, 17 :1267–1302.

[Paquin et al., 1999] Paquin, A., Sabar, H., and Berveiller, M. (1999). Integral formulation and self-consistent modelling of elastoviscoplastic behavior of heterogeneous materials. *Archive of applied mechanics*, 69 :14–35.

[Parret-Fréaud et al., 2017] Parret-Fréaud, A., Rey, C., Feyel, F., Bovet, C., Gosselet, P., Marchand, B., and Spillane, N. (2017). HPC en contexte industriel : méthodes de décomposition de domaine robustes et application à des calculs époustouflants sur cas métiers. In *13^{me} Colloque National en Calcul des Structures (CSMA)*, Mai, Giens.

[Peirce et al., 1983] Peirce, D., Asaro, R., and Needleman, A. (1983). Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids. *Acta Metall.*, 31 :1951–1976.

[Pollock and Field, 2002] Pollock, T. and Field, R. (2002). *Dislocations and High-Temperature Plastic Deformation of Superalloy Single Crystals*, chapter In : Dislocations in Solids vol. 11 (F.N.R. Nabarro and M.S. Duesbery), pages 547–618. Springer.

[Pollock and Tin, 2006] Pollock, T. and Tin, S. (2006). Nickel-based superalloys for advanced turbine engines : Chemistry, microstructure, and properties. *Journal of propulsion and power*, 22 :361–374.

[Ponte Castaneda, 1991] Ponte Castaneda, P. (1991). The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites. *J. Mech. Phys. Sol.*, 39 :45–71.

[Ponte Castaneda, 1996] Ponte Castaneda, P. (1996). Exact second-order estimates for the effective mechanical properties of nonlinear composite materials. *J. Mech. Phys. Sol.*, 44 :827–862.

[Pottier et al., 2011] Pottier, T., Toussaint, F., and Vacher, P. (2011). Contribution of heterogeneous strain field measurements and boundary conditions modelling in inverse identification of material parameters. *Eur. J. Mech., A/Solids*, 30 :373–382.

[Pouillier et al., 2012] Pouillier, E., A.-F. Gourgues, Tanguy, D., and Busso, E. (2012). A study of intergranular fracture in an aluminium alloy due to hydrogen embrittlement. *Int. J. of Plasticity*, 34 :139–153.

[Qidwai et al., 2012] Qidwai, S., Turner, D., Niezgoda, S., Lewis, A., Geltmacher, A., Rowenhorst, D., and Kalidindi, S. (2012). Estimating the response of polycrystalline materials using sets of weighted statistical volume elements. *Acta Mat.*, 60 :5284–5299.

[Rae and Reed, 2007] Rae, C. and Reed, R. (2007). Primary creep in single crystal superalloys : Origins, mechanisms and effects. *Acta Mat.*, 55 :1067–1081.

[Reed, 2006] Reed, R. C. (2006). *The superalloys : Fundamentals and Applications*. Cambridge University Press.

[Rekik et al., 2015] Rekik, A., Allaoui, S., Gasser, A., Blond, E., Andreev, K., and Sinnema, S. (2015). Experiments and nonlinear homogenization sustaining mean-field theories for refractory mortarless masonry : The classical secant procedure and its improved variants. *Eur. J. Mech., A/Solids*, 49 :67–81.

[Rice, 1970] Rice, J. (1970). On the structure of stress-strain relations for time–dependent plastic deformation in metals. *J. of Applied Mechanics*, 37 :728–737.

[Rice, 1971] Rice, J. (1971). Inelastic constitutive relations for solids : An internal variable theory and its application to metal plasticity. *J. Mech. Phys. Sol.*, 19 :433–455.

[Robert and Mareau, 2015] Robert, C. and Mareau, C. (2015). A comparison between different numerical methods for the modeling of polycrystalline materials with an elastic–viscoplastic behavior. *Computational Materials Science*, 103 :134–144.

[Robert and Wattrisse, 2009] Robert, L. and Wattrisse, B. (2009). Evaluation d'erreurs de mesure par corrélation d'images numériques : méthodologie et résultats. In *19e Congrès Français de Mécanique*. AUM-AFM.

[Roters et al., 2010] Roters, F., Eisenlohr, P., Hantcherli, L., Tjahjanto, D., Bieler, T., and Raabe, D. (2010). Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling : Theory, experiments, applications. *Acta Mat.*, 58 :1152–1211.

[Rougier et al., 1993] Rougier, Y., Stolz, C., and Zaoui, A. (1993). Représentation spectrale en viscoélasticité linéaire des matériaux hétérogènes. *C. R. Acad. Sci. Paris, Série II*, 316 :1517–1522.

[Réthoré et al., 2013] Réthoré, J., Elguedj, M., Coret, M., Chaudet, P., and Combescure, A. (2013). Robust identification of elasto-plastic constitutive law parameters from digital images using 3D kinematics. *Int. J. Sol. Structures*, 50 :73–85.

[Sabar et al., 2002] Sabar, H., Berveiller, M., Favier, V., and Berbenni, S. (2002). A new class of micro–macro models for elastic–viscoplastic heterogeneous materials. *Int. J. Sol. Structures*, 39 :3257–3276.

[Sai and Cailletaud, 2006] Sai, K. and Cailletaud (2006). A multi-mechanism model for the description of ratchetting : effect of the scale transition rule and of the coupling between hardening variables. In Khan, A. and Kazmi, R., editors, *Plasticity'06 : Anisotropy, texture, Dislocations and multiscale modeling in finite plasticity*, Halifax, Canada.

[Sai et al., 2006] Sai, K., Cailletaud, G., and Forest, S. (2006). Micro-mechanical modeling of the inelastic behavior of directionally solidified materials. *Mech. of Materials*, 38 :203–217.

[Sapardanis et al., 2016] Sapardanis, H., Maurel, V., Koster, A., Duvinage, S., Borit, F., and Guipont, V. (2016). Influence of macroscopic shear loading on the growth of an interfacial crack initiated from a ceramic blister processed by laser shock. *Surface and Coatings Technology*, 291 :430–443.

[Sauzay, 2006] Sauzay, M. (2006). Effet de l'anisotropie élastique cristalline sur la distribution des facteurs de Schmid à la surface des polycristaux. *Comptes Rendus de Mécanique*, 334 :353–361.

[Schreier et al., 2000] Schreier, H., Braasch, J., and Sutton, M. (2000). Systematic errors in digital image correlation caused by intensity interpolation. *Opt. Eng.*, 39 :2915–2921.

[Segurado et al., 2012] Segurado, J., Lebensohn, R., Llorca, J., and Tomé, C. N. (2012). Multiscale modeling of plasticity based on embedding the viscoplastic self-consistent formulation in implicit finite elements. *Int. J. of Plasticity*, 28 :124–140.

[Shenoy et al., 2005] Shenoy, M., Kumar, R., and McDowell, D. (2005). Modeling effects of nonmetallic inclusions on LCF in DS nickel-base superalloys. *Int. J. Fatigue*, 27 :113–127.

[Shenoy et al., 2006] Shenoy, M., McDowell, D., and Neu, R. (2006). Transversely isotropic viscoplasticity model for a directionally solidified Ni-base superalloy. *Int. J. of Plasticity*, 22 :2301–2326.

[Silver et al., 2016] Silver, D., Huang, A., Maddison, C., Guez, A., Sifre, L., van den Driessche, G., Schrittwieser, J., Antonoglou, I., Panneershelvam, V., Lanctot, M., Dieleman, S., Grewe, D., Nham, J., Kalchbrenner, N., Sutskever, I., Lillicrap, T., Leach, M., Kavukcuoglu, K., Graepel, T., and Hassabis, D. (2016). Mastering the game of go with deep neural networks and tree search. *Nature*, 529 :484–489.

[Stinville et al., 2015] Stinville, J.-C., Gallup, K., and Pollock, T. (2015). Transverse Creep of Nickel-Base Superalloy Bicrystals. *Metallurgical and Materials Transactions*, 46A :2516–2529.

[Suquet, 1985] Suquet, P. (1985). Elements of homogeneization for inelastic solid mechanics. In Sanchez-Palencia, E. and Zaoui, A., editors, *Homogeneization Techniques for Composite Media*, pages 193–278, Lecture notes in physics, No. 272. Springer Verlag.

[Suvorov and Dvorak, 2002] Suvorov, A. and Dvorak, G. (2002). Rate form of the Eshelby and Hill tensors. *Int. J. Sol. Structures*, 39 :5659–5678.

[Tabourot et al., 1997] Tabourot, L., Fivel, M., and Rauch, E. (1997). Generalised constitutive laws for FCC single crystals. *Materials Science and Engineering*, A234-236 :639–642.

[Taylor, 1938] Taylor, G. (1938). Plastic strain in metals. *J. Inst. Metals.*, 62 :307–324.

[Teissedre, 2016] Teissedre, J. (2016). Communication personnelle.

[Texier et al., 2014] Texier, D., Monceau, D., Mainguy, R., and Andrieu, E. (2014). Evidence of high-temperature strain heterogeneities in a nickel-based single-crystal superalloy. *Advanced Engineering Materials*, 16 :60–64.

[Thibault et al., 2013] Thibault, K., Locq, D., Caron, P., Boivin, D., Renollet, Y., and Bréchet, Y. (2013). Influence of microstructure on local intra- and intergranular deformations during creep of a nickel-based superalloy at 700°C. *Materials Science and Engineering A*, 588 :14–21.

[Wang et al., 2013] Wang, H., Koster, A., Maurel, V., and Rémy, L. (2013). Experimental and numerical study of crack propagation under biaxial loading conditions at high temperature (communication orale).

[Weng, 1981] Weng, G. (1981). Self-consistent determination of time–dependent behavior of metals. *J. of Applied Mechanics*, 48 :41–46.

[Willis, 1981] Willis, M. (1981). Variational and related methods for the overall properties of composites. *Advances in Appl. Mech.*, 21 :1–78.

[Wisniewski and Beddoes, 2009] Wisniewski, A. and Beddoes, J. (2009). Influence of grain-boundary morphology on creep of a wrought Ni-base superalloy. *Materials Science and Engineering A*, 510-511 :266–272.

[Workbench manual, 2014] Workbench manual (2014). *ANSYS Workbench (release 16)*. http ://-support.ansys.com.

[Xu et al., 2007] Xu, W., Ferry, M., Mateescu, N., Cairney, J., and Humphreys, F. (2007). Techniques for generating 3-D EBSD microstructures by FIB tomography. *Materials Characterization*, 58 :961–967.

[Yaguchi, 2012] Yaguchi, M. (2012). Anisotropic viscoplasticity constitutive model for directionally solidified superalloy. *Materials at High Temperatures*, 29 :308–314.

[Yaguchi et al., 2007] Yaguchi, M., Yamamoto, M., Ogata, T., and Ohno, N. (2007). An anisotropic constitutive model for a directionally solidified superalloy. *Key Eng. Mater.*, 340-341 :901–906.

[Yeh et al., 2011] Yeh, A.-C., Lu, K.-W., Kuo, C.-M., Bor, H.-Y., and Wei, C.-N. (2011). Effect of serrated grain boundaries on the creep property of inconel 718 superalloy. *Materials Science and Engineering A*, 530 :525–529.

[Yoshida et al., 2009] Yoshida, K., Brenner, R., Bacroix, B., and 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.

[Z-set 8.6, 2016] Z-set 8.6 (2016). Non-linear material and structure analysis suite, Version 8-6. http://www.zset-software.com/. Accessed : 2016-12-12.

[Zaoui, 1997] Zaoui, A. (1997). *Structural morphology and constitutive behaviour of microheterogeneous materials*, chapter In : Continuum Micromechanics (P. Suquet), pages 291–347. Springer Verlag.

[Zaoui and Masson, 2000] Zaoui, A. and Masson, R. (2000). Micromechanics-based modeling of plastic polycrystals : an affine formulation. *Materials Science and Engineering*, A285 :418–424.

[Zeghadi et al., 2007a] Zeghadi, A., Forest, S., Gourgues, A.-F., and Bouaziz, O. (2007a). Ensemble averaging stress–strain fields in polycrystalline aggregates with a constrained surface microstructure–Part 2 : Crystal plasticity. *Philosophical Magazine*, 87 :1425–1446.

[Zeghadi et al., 2007b] Zeghadi, A., N'Guyen, F., Forest, S., Gourgues, A.-F., and Bouaziz, O. (2007b). Ensemble averaging stress–strain fields in polycrystalline aggregates with a constrained free surface microstructure–Part 1 : Anisotropic elastic behaviour. *Philosophical Magazine*, 87 :1401–1424.

[Zhang et al., 2016] Zhang, H., Diehl, M., Roters, F., and Raabe, D. (2016). A virtual laboratory using high resolution crystal plasticity simulations to determine the initial yield surface for sheet metal forming operations. *Int. J. of Plasticity*, 80 :111–138.

ANNEXE 1

Notations couramment utilisées dans ce manuscrit

Outils mathématiques

x	Scalaire
$\underline{x}$	Position d'un point dans l'espace
$\vec{x}$	Vecteur
$\underset{\sim}{\boldsymbol{x}}, x_{ij}, x_m$	Tenseur d'ordre 2, en notation indicielle classique dans un espace de dimension 3 avec $\forall i, j \in [1,3]$, en notation de Voigt pour un tenseur symétrique avec $\forall m \in [1,6]$
$\underset{\approx}{\boldsymbol{x}}, x_{ijkl}, x_{mn}$	Tenseur d'ordre 4, en notation indicielle classique dans un espace de dimension 3 avec $\forall i, j, k, l \in [1,3]$, en notation de Voigt pour un tenseur symétrique avec $\forall m, n \in [1,6]$
δ_{ij}	Symbole de Kronecker (vaut 1 si $i = j$ et 0 sinon)
x^s	Variable scalaire exprimée sur les systèmes de glissement
$\underset{\sim}{\boldsymbol{x}}^g$	Variable tensorielle exprimée sur les phases cristallographiques (voir le chapitre 2 pour cette notion)
$\underset{\approx}{\boldsymbol{I}}, I_{ijkl} = \frac{1}{2}\left(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}\right)$	Tenseur identité d'ordre 4 (neutre pour le produit doublement contracté), en écriture indicielle avec $\forall i, j, k, l \in [1,3]$
$x = y_i z_i \Leftrightarrow x = \sum_{i=1}^{3} y_i z_i$	Convention de sommation d'Einstein
$x = \underset{\sim}{\boldsymbol{y}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{z}} = y_{ij} z_{ij}$	Produit doublement contracté entre deux tenseurs d'ordre 2 donnant un scalaire
$\underset{\sim}{\boldsymbol{x}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{y}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{z}}, x_{ij} = y_{ijkl} z_{kl}$	Produit doublement contracté entre un tenseur d'ordre 4 et un tenseur d'ordre 2 donnant un tenseur d'ordre 2, en écriture indicielle avec $\forall i, j, k, l \in [1,3]$

$\underset{\approx}{\boldsymbol{x}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{y}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{z}}$, $x_{ijmn} = y_{ijkl} z_{klmn}$	Produit doublement contracté entre deux tenseurs d'ordre 4 donnant un tenseur d'ordre 4, en écriture indicielle avec $\forall i, j, k, l, m, n \in [1, 3]$
$\underset{\sim}{\boldsymbol{x}} = \vec{y} \otimes \vec{z}$, $x_{ij} = y_i z_j$	Produit tensoriel entre deux vecteurs donnant un tenseur d'ordre 2, en écriture indicielle avec $\forall i, j \in [1, 3]$

Abréviations

DS	Solidification Dirigée (Directionally solidified)
CPFEM	Crystal Plasticity Finite Element Method
FF	Modélisation en champ complet (Full Field)
MF	Modélisation en champ moyen (Mean Field)
VER	Volume élémentaire représentatif (Representative Volume Element)
MHE	Milieu homogène équivalent (Homogeneous equivalent medium)
KBW	Modèle en champ moyen de Kröner Budiansky et Wu (fait aussi référence au modèle de Köner Weng pour la plasticité dépendante du temps)
TF ou CT	Modèle en champ moyen dit à champ translaté
EBSD	Electron BackScatter Diffraction
LVDT	Linear Variable Differential Transformer, capteur de déplacement
CFC	Maille cristallographique cubique à faces centrées

ANNEXE 2

Loi de comportement locale à différentes températures

Dans le chapitre 1, nous avons présenté deux jeux de paramètres pour la loi locale en plasticité cristalline (échelle d'un monograin de DS200+Hf) aux deux températures cibles pour Safran, 650 °C et 900 °C. Le recalage est alors effectué à partir des résultats expérimentaux obtenus par **Mataveli Suave** à l'institut PPRIME [Mataveli Suave, 2017]. Toutefois, l'identification à ces deux températures ne suffit pas pour réaliser des calculs anisothermes comme ceux menés sur les aubes de turbines. En effet, le gradient thermique utilisé dans la mise en données d'un calcul sur une aube basse pression en DS200+Hf possède des valeurs avoisinant 1100 °C. C'est pourquoi, des jeux de paramètres à 1000 °C et 1100 °C sont définis dans la loi de comportement homogène utilisé par le bureau d'étude de Safran Aircraft Engines (identifiés sur la base d'essais expérimentaux dans la direction longitudinale du DS200+Hf). La loi de comportement utilisée par Safran Aircraft Engines s'écrit :

$$\left\{\begin{array}{rcl} \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{vp} & = & \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_r^{vp} + \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_l^{vp} \\ \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_r^{vp} & = & \left\langle \dfrac{f_r(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}, \underset{\sim}{\boldsymbol{X}})}{K_r} \right\rangle^{n_r} \dfrac{\partial f_r}{\partial \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}, \quad f_r(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}, \underset{\sim}{\boldsymbol{X}}) = |\sigma_{eq}(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{X}})| - r_{0,r} \\ \underset{\sim}{\boldsymbol{X}} & = & \frac{2}{3} C \underset{\sim}{\boldsymbol{\alpha}}, \ \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\alpha}}} = \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{in} - \frac{3}{2}\frac{D}{C} \underset{\sim}{\boldsymbol{\alpha}} \dot{p} \\ \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_l^{vp} & = & \left\langle \dfrac{f_l(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}})}{K_l} \right\rangle^{n_l} \dfrac{\partial f_l}{\partial \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}, \quad f_l(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}) = |\sigma_{eq}(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}| - r_{0,l} \end{array}\right. \tag{1}$$

avec l pour les vitesses lentes et r pour les rapides. La fonction f_j avec $j \in [l, r]$ est définie par le critère isotrope de von **Mises**. D'autre part, la loi de comportement locale d'un monograin de DS200+Hf s'écrit :

$$\left\{\begin{array}{rcl} \dot{\gamma}^s & = & \dot{\gamma}_r^s + \dot{\gamma}_l^s \\ \dot{\gamma}_r^s & = & \left\langle \dfrac{|\tau^s - x^s| - \tau_c}{K_r} \right\rangle^{n_r} \text{signe}(\tau^s - x^s) \\ x^s & = & c_1 \alpha^s + c_2 \gamma_r^s \text{ avec } \dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}_r^s - d\dot{v}^s \alpha^s \\ \dot{\gamma}_l^s & = & \left\langle \dfrac{|\tau^s|}{K_l} \right\rangle^{n_l} \text{signe}(\tau^s) \\ \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{vp} & = & \sum_s \dot{\gamma}^s \underset{\sim}{\boldsymbol{m}}^s \end{array}\right. \tag{2}$$

En utilisant l'hypothèse de « DS parfait », déjà détaillée dans le corps principal du manuscrit, la réponse mécanique de l'alliage DS dans la direction longitudinale est confondue avec la

réponse d'un monograin de DS200+Hf sollicitée selon un axe cristallographique de type $\langle 001 \rangle$. Pour ce type de chargement uniaxial, la vitesse de déformation plastique issue du modèle de plasticité cristalline peut s'écrire :

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{vp} = \frac{8}{\sqrt{6}}\dot{\gamma}^s \tag{3}$$

Finalement, en remplaçant la vitesse de glissement par l'expression donnée ci-dessus, il est possible de trouver une équivalence entre les paramètres issus du modèle macroscopique de Safran Aircraft Engines et les paramètres de la loi de plasticité cristalline (CP) utilisée dans ces travaux. En particulier, nous trouvons :

$$\begin{cases} r_{0,r} &= \sqrt{6}\tau_c \\ D &= \frac{\sqrt{6}}{8}d \\ C &= 8c_1 \\ n_r &= n_r^{CP} \\ n_l &= n_l^{CP} \\ K_r &= \sqrt{6}\left(\frac{\sqrt{6}}{8}\right)^{\frac{1}{n_r^{CP}}} K_r^{CP} \\ K_l &= \sqrt{6}\left(\frac{\sqrt{6}}{8}\right)^{\frac{1}{n_l^{CP}}} K_l^{CP} \end{cases} \tag{4}$$

Nous proposons donc deux jeux de paramètres pour le modèle CP à partir des résultats obtenus avec le modèle Safran aux deux températures, $1000\,°\mathrm{C}$ et $1100\,°\mathrm{C}$. Le tenseur d'élasticité d'un monograin de DS200+Hf a été obtenu, par mesure résonnante, jusqu'à $960\,°\mathrm{C}$ puis extrapoler jusqu'à $1200\,°\mathrm{C}$. Pour les températures inférieures à $650\,°\mathrm{C}$, nous supposons que les paramètres n'évoluent pas. L'essai biaxial réalisé dans le chapitre 4 à température ambiante montre une bonne corrélation de la simulation numérique utilisant les paramètres identifiés à $650\,°\mathrm{C}$. Pour les températures situées entre $650\,°\mathrm{C}$ et $900\,°\mathrm{C}$, une identification sur des essais expérimentaux serait nécessaire pour voir quels sont les différents mécanismes de déformation en jeu dans cette plage de températures intermédiaire.

Paramètres à $1000\,°\mathrm{C}$:

Les paramètres de la loi de plasticité cristalline utilisés à $1000\,°\mathrm{C}$ sont présentés dans le tableau .1.

c_1 [MPa]	c_2 [MPa]	d	C_{1111} [MPa]	C_{1122} [MPa]	C_{1212} [MPa]
66 000	0	1 100	150 000	89 000	61 500
K_r [MPa s$^{1/n_r}$]	n_r	K_l [MPa s$^{1/n_l}$]	n_l	τ_c [MPa]	
240	9	1 900	5,3	20	

Table .1 – *Résultat de l'identification des paramètres du modèle local pour le DS200 à* $1000\,\mathrm{MPa}$.

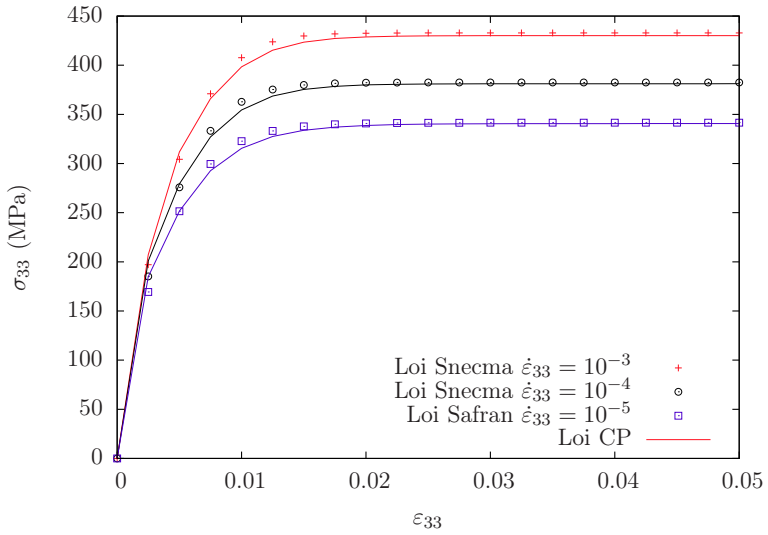


Figure .2 – *Confrontation des réponses mécaniques en traction uniaxiale obtenues par le modèle de Safran et le modèle en plasticité cristalline avec le jeu de paramètres représentant le comportement du DS200+Hf en sens long à* 1000 °C.

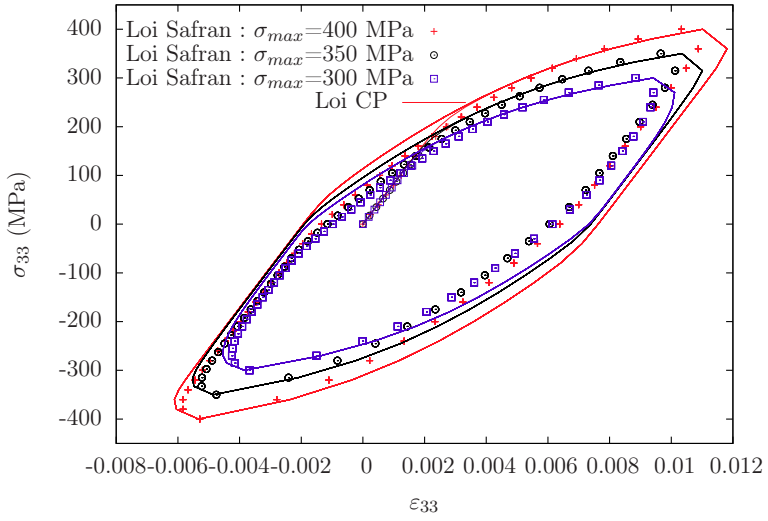


Figure .3 – *Confrontation des réponses mécaniques sur une sollicitation cyclique de rapport en contrainte $R_\sigma = -1$ obtenues par le modèle de Safran et le modèle en plasticité cristalline avec le jeu de paramètres représentant le comportement du DS200+Hf en sens long à* 1000 °C.

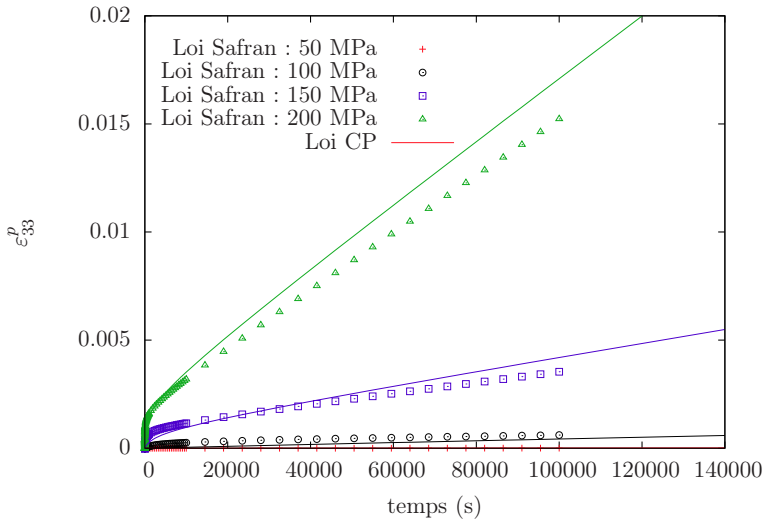


Figure .4 – *Confrontation des réponses mécaniques en fluage obtenues par le modèle de Safran et le modèle en plasticité cristalline avec le jeu de paramètres représentant le comportement du DS200+Hf en sens long à* 1000 °C.

Paramètres à 1100 °C :

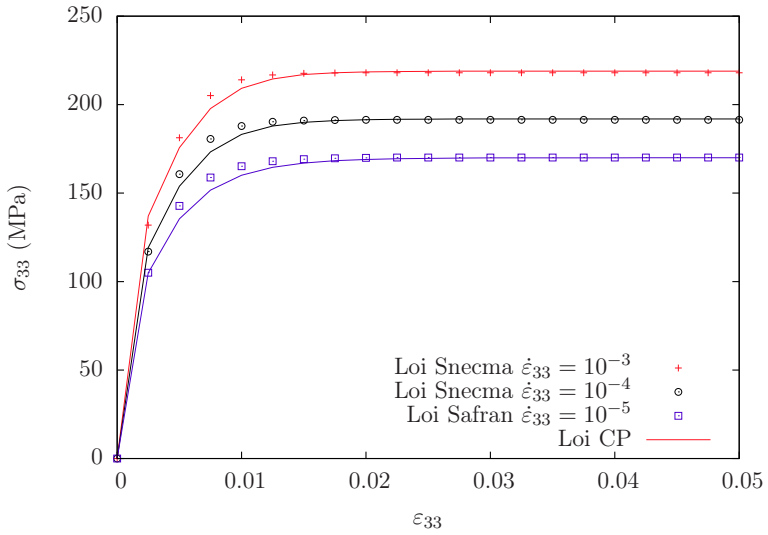


Figure .5 – *Confrontation des réponses mécaniques en traction uniaxiale obtenues par le modèle de Safran et le modèle en plasticité cristalline avec le jeu de paramètres représentant le comportement du DS200+Hf en sens long à* 1100 °C.

Les paramètres de la loi de plasticité cristalline utilisés à 1100 °C sont présentés dans le tableau .2.
Un récapitulatif des paramètres du modèle local dans la gamme [20-1100 °C] est proposé dans le tableau .3.

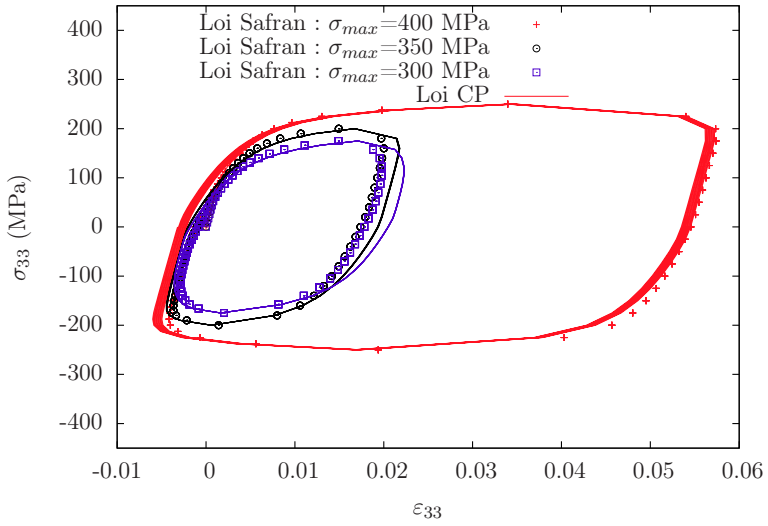


Figure .6 – *Confrontation des réponses mécaniques sur une sollicitation cyclique de rapport en contrainte $R_\sigma = -1$ obtenues par le modèle de Safran et le modèle en plasticité cristalline avec le jeu de paramètres représentant le comportement du DS200+Hf en sens long à* 1100 °C.

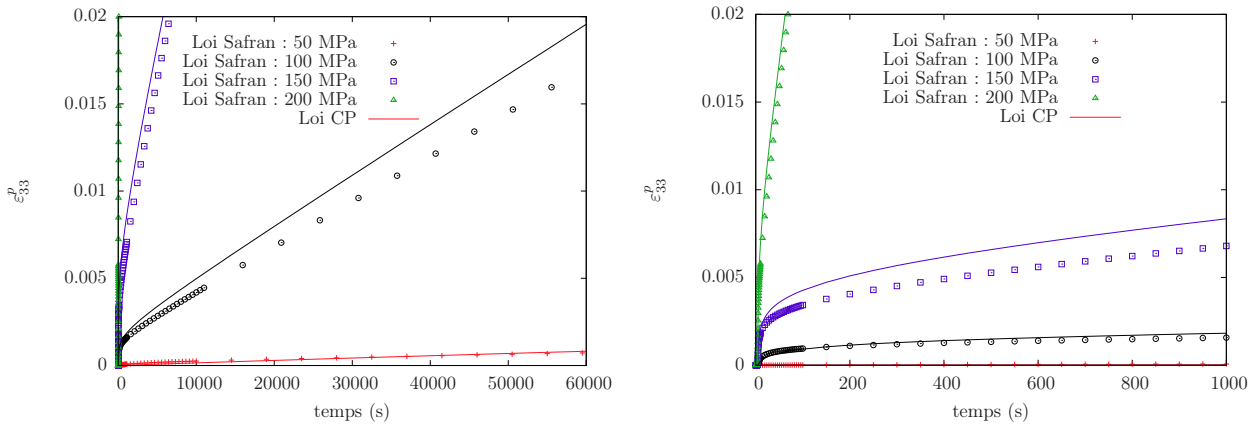


Figure .7 – *Confrontation des réponses mécaniques en fluage obtenues par le modèle de Safran et le modèle en plasticité cristalline avec le jeu de paramètres représentant le comportement du DS200+Hf en sens long à* 1100 °C.

c_1 [MPa]	c_2 [MPa]	d	C_{1111} [MPa]	C_{1122} [MPa]	C_{1212} [MPa]
39 000	0	1 100	130 000	83 600	53 300
K_r [MPa s$^{1/n_r}$]	n_r	K_l [MPa s$^{1/n_l}$]	n_l	τ_c [MPa]	
120	7,7	1400	4,6	12	

Table .2 – *Résultat de l'identification des paramètres du modèle local pour le DS200 à* 1100 MPa.

	20-650 °C	900 °C	1000 °C	1100 °C
C_{1111} [MPa]	203 760	190 200	150 000	130 000
C_{1122} [MPa]	125 490	110 770	89 000	83 600
C_{1212} [MPa]	112 000	118 500	61 500	53 300
τ_c [MPa]	235	30	20	12
K_r [MPa s$^{1/n_r}$]	180	540	240	120
K_l [MPa s$^{1/n_r}$]	1 000	2 100	1 900	1400
n_r	20	15,5	9	7,7
n_l	30	6	5,3	4,6
c_1 [MPa]	85 000	110 000	66 000	39 000
c_2 [MPa]	1 200	0	0	0
d	1 100	1 100	1 100	1 100

Table .3 – *Evolution des paramètres du modèle local en fonction de la température pour le DS200+Hf.*

ANNEXE 3

Bornes de Reuss et Voigt dans le cas d'un agrégat DS

Premièrement, les bornes de **Reuss** et **Voigt** supposent respectivement une contrainte ou une déformation uniforme au sein d'un milieu hétérogène. Pour le cas d'un polycristal, le tenseur d'élasticité du grain g est représenté dans le repère macroscopique par une matrice $[C^g]$ obtenue à partir de la matrice $[C^0]$ qui a une expression simple dans le repère cristallographique. Cette opération s'effectue en utilisant l'opérateur de changement de base $\underset{\approx}{\boldsymbol{R}}^g$ construit à partir des trois angles d'**Euler** du grain g :

$$C^g_{ijkl} = R^g_{ijpq} C^0_{pqmn} {}^T R^g_{mnkl} \tag{5}$$

où $R^g_{ijpq} = P^g_{iq} P^g_{jq}$. Nous supposons un matériau « DS parfait », c'est-à-dire que tous les grains ont un axe cristallographique de type $\langle 001 \rangle$ de la maille élémentaire CFC commun et confondu avec un axe macroscopique ($\vec{x}_3$ par exemple). Alors, un seul angle d'**Euler** ϕ_1 est nécessaire pour définir l'orientation cristallographique d'un grain et la rotation peut-être représentée par la matrice 3×3 $[P^g]$ selon :

$$[P^g] = \begin{pmatrix} \cos(\phi_1) & -\sin(\phi_1) & 0 \\ \sin(\phi_1) & \cos(\phi_1) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

On introduit donc la matrice 9×9 $[R^g]$ en utilisant la règle de regroupement des indices suivante (celle du code Zset) [2] :

$$\begin{cases} 11 \rightarrow 1 \\ 22 \rightarrow 2 \\ 33 \rightarrow 3 \\ 12 \rightarrow 4, \ 21 \rightarrow 7 \\ 23 \rightarrow 5, \ 32 \rightarrow 8 \\ 31 \rightarrow 6, \ 13 \rightarrow 9 \end{cases}$$

$$[R^g] = \begin{pmatrix} \cos^2(\phi_1) & \sin^2(\phi_1) & 0 & -\cos(\phi_1)\sin(\phi_1) & 0 & 0 & -\cos(\phi_1)\sin(\phi_1) & 0 & 0 \\ \sin^2(\phi_1) & \cos^2(\phi_1) & 0 & \cos(\phi_1)\sin(\phi_1) & 0 & 0 & \cos(\phi_1)\sin(\phi_1) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cos(\phi_1)\sin(\phi_1) & -\cos(\phi_1)\sin(\phi_1) & 0 & \cos^2(\phi_1) & 0 & 0 & -\sin^2(\phi_1) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cos(\phi_1) & 0 & 0 & 0 & \sin(\phi_1) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cos(\phi_1) & 0 & -\sin(\phi_1) & 0 \\ \cos(\phi_1)\sin(\phi_1) & -\cos(\phi_1)\sin(\phi_1) & 0 & -\sin^2(\phi_1) & 0 & 0 & \cos^2(\phi_1) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sin(\phi_1) & 0 & \cos(\phi_1) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\sin(\phi_1) & 0 & 0 & 0 & \cos(\phi_1) \end{pmatrix}$$

Même si la matrice $[R^g]$ n'est pas symétrique, la relation 5 permet bien d'assurer la symétrie du tenseur $\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^g$. Dans ce cas simple d'alliages DS, il est possible de trouver des relations analytiques

2. Il est important de mentionner que ce regroupement des indices pour l'écriture matricielle des tenseurs d'ordre 4 est différent du regroupement conventionnel où $12 \rightarrow 6$

pour les bornes de **Voigt** et **Reuss**. Par exemple, pour la borne de **Voigt** (les développements sont les mêmes pour la borne de **Reuss**), le tenseur d'élasticité du milieu hétérogène (agrégat DS dans notre cas) s'exprime :

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{eff} = \left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{C}}^{g} \right\rangle \tag{6}$$

où $\langle . \rangle$ représente une moyenne volumique. On note $[C^{eff}]$ la matrice représentant le tenseur d'élasticité du polycristal, $[C^g]$ la matrice représentant le tenseur d'élasticité du grain g dans le repère macroscopique et $[C^0]$ la matrice représentant le tenseur d'élasticité de tous les grains dans leur repère cristallographique. Avec les hypothèses faites sur l'orientation cristallographique des grains, cette équation peut s'écrire :

$$[C^{eff}]_{ij} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} [C^g]_{ij} d\phi_1 \tag{7}$$

où $i, j \in [1, 6]$ avec la notation de Voigt.

Obtention de C_{11} : En utilisant la relation 5, on trouve :

$$C_{11}^g = (\cos^4(\phi_1) + \sin^4(\phi_1))C_{11}^0 + \cos^2(\phi_1)\sin^2(\phi_1)(2C_{12}^0 + C_{44}^0) \tag{8}$$

En utilisant,

$$(\cos^4(\phi_1)+\sin^4(\phi_1)) = \left(\cos^2(\phi_1) + \sin^2(\phi_1)\right)^2 - 2\cos^2(\phi_1)\sin^2(\phi_1) = 1 - 2\cos^2(\phi_1)\sin^2(\phi_1)$$

on peut réécrire l'expression de la composante C_{11}^g suivant :

$$C_{11}^g = C_{11}^0 - \cos^2(\phi_1)\sin^2(\phi_1)\left(2(C_{11}^0 - C_{12}^0) - C_{44}^0\right) \tag{9}$$

En posant $A^0 = 2(C_{11}^0 - C_{12}^0) - C_{44}^0$, qui est un coefficient d'anisotropie indépendant de l'orientation cristallographique des grains, on peut exprimer la composante C_{11}^{eff} de la matrice $[C^{eff}]$ selon :

$$C_{11}^{eff} = C_{11}^0 - A^0 \frac{2}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos^2(\phi_1)\sin^2(\phi_1) d\phi_1 \tag{10}$$

Le calcul de l'intégrale dans l'équation précédente peut se faire selon :

$$\begin{aligned}
\frac{2}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos^2(\phi_1)\sin^2(\phi_1) d\phi_1 &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{1}{2}\left(1 + \cos(2\phi_1)\right) - \left(\frac{1}{2}\left(1 + \cos(2\phi_1)\right)\right)^2 \right) d\phi_1 \\
&= \frac{2}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{1}{2}\left(1 + \cos(2\phi_1)\right) \ldots \right. \\
&\ldots \left. - \frac{1}{4}\left(1 + 2\cos(2\phi_1) + \frac{1}{2}\left(1 + \cos(4\phi_1)\right)\right) \right) d\phi_1 \\
&= \frac{2}{\pi}\left(\frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{8} - \frac{\pi}{16}\right) \\
&= \frac{1}{8}
\end{aligned}$$

Finalement, on trouve une relation simple pour C_{11}^{eff} :

$$C_{11}^{eff} = C_{11}^0 - \frac{A^0}{8} \tag{11}$$

Obtention de C_{12} : La relation 5 permet d'obtenir :

$$C_{12}^{g} = (\cos^4(\phi_1) + \sin^4(\phi_1))C_{11}^{0} + 2\cos^2(\phi_1)\sin^2(\phi_1)C_{12}^{0} - \cos^2(\phi_1)\sin^2(\phi_1)C_{44}^{0} \tag{12}$$

On peut en déduire une expression pour C_{12}^{eff} :

$$C_{12}^{eff} = C_{11}^{0} - (2(C_{11}^{0} - C_{12}^{0}) + C_{44}^{0})\frac{2}{\pi}\int_{0}^{\frac{\pi}{2}} \cos^2(\phi_1)\sin^2(\phi_1)d\phi_1 \tag{13}$$

En utilisant le résultat obtenu précédemment sur le calcul de l'intégrale de $\cos^2(\phi_1)\sin^2(\phi_1)$, on en déduit :

$$C_{12}^{eff} = C_{11}^{0} - \frac{1}{4}C_{11}^{0} + \frac{1}{4}C_{12}^{0} - \frac{1}{8}C_{44}^{0}$$

$$C_{12}^{eff} = \frac{3}{4}C_{11}^{0} + \frac{1}{4}C_{12}^{0} - \frac{1}{8}C_{44}^{0} \tag{14}$$

Le milieu étant isotrope transverse, la dernière composante du tenseur d'élasticité s'obtient à partir de :

$$C_{44}^{eff} = \frac{1}{2}(C_{11}^{eff} - C_{12}^{eff}) \tag{15}$$

Il est important de mentionner que les relations pour la borne de **Reuss** sont identiques (il faut remplacer seulement les composantes de la matrice $[C^0]$ représentant le tenseur d'élasticité dans le repère cristallographique par celles de la matrice $[S^0]$ représentant le tenseur des souplesses dans le repère cristallographique (voir la partie 2.2).

ANNEXE 4

D'autres transitions d'échelles en élastoviscoplasticité

Nous traitons dans cette annexe les difficultés inhérentes à l'application du schéma auto-cohérent pour un milieu hétérogène ayant un comportement élasto-viscoplastique. Le premier constat est la présence de la contrainte à deux ordres de dérivation par rapport au temps dans l'expression de la vitesse de déformation totale :

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}} + g(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}) \tag{16}$$

L'exemple classique proposé par **Suquet** [Suquet, 1985] montre pour un comportement local maxwellien qui s'écrit :

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^g = \underset{\approx}{\boldsymbol{A}}^g : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^g + \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^g : \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^g \tag{17}$$

que la vitesse de déformation du milieu homogène équivalent s'écrit :

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{A}}^{eff} : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}^{eff} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + \int_s^t \underset{\approx}{\boldsymbol{J}}(t-s) : \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}}(s) ds \tag{18}$$

Le comportement effectif ne doit donc pas être cherché sous la même forme que le comportement local. Un dernier terme intégral fait référence à une interaction à mémoire longue. Ce phénomène peut se traduire par une dépendance du comportement effectif à toute l'histoire du chargement s'étant déroulée avant l'instant cherché t. Ce sont ces résultats qui ont initié la recherche d'approche auto-cohérente tenant compte de manière plus ou moins rigoureuse de ce dernier terme. On distinguera deux voies de recherche, une qui tente d'étendre cette manière de résoudre le problème à l'élasto-viscoplasticité (approche héréditaire) alors qu'une autre considère que la dépendance au trajet de chargement est stockée dans les variables internes du modèle (approche à variables internes).

Approche héréditaire

En premier lieu, nous citons les travaux de **Hashin** [Hashin, 1969] puis de **Rougier et al** [Rougier et al., 1993], qui traite le problème d'inclusion dans le cas de la viscoélasticité linéaire non vieillissante. L'idée consiste à transférer la loi de comportement héréditaire locale dans le domaine de Laplace (principe de correspondance de **Mandel**). Le problème symbolique relie par un produit simple la contrainte à la déformation. Par exemple, des solutions analytiques ont été étudiées pour un matériau biphasé isotrope dont chaque phase a un comportement maxwellien isotrope incompressible dans [Rougier et al., 1993]. La solution obtenue dans le cas de l'élasticité linéaire pure est alors utilisée pour estimer le module effectif viscoélastique dans le domaine de Laplace. Ensuite, la transformée inverse permet de revenir à une solution

dans l'espace temporel. La linéarisation affine proposée par **Masson** et **Zaoui** généralise cette démarche au cas de l'élasto-viscoplasticité. La première hypothèse est l'expression du comportement local sous une forme linéarisée à l'instant τ dont nous souhaitons connaître l'état du matériau et qui dépend de toute l'histoire précédente $0 < t < \tau$ telle que :

$$\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}(t,\tau) = \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\sigma}}}(t) + \underset{\approx}{\boldsymbol{M}}(\tau) : \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}(t) + \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^0(t,\tau) \tag{19}$$

où $\begin{cases} M(\tau) &= \dfrac{\partial g}{\partial \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}(\tau)\right) \\ \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^0(t,\tau) &= \left[g\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}(\tau)\right) - \underset{\approx}{\boldsymbol{M}}(\tau) : \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}(\tau)\right] + \left[g\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}(t)\right) - g\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}(\tau)\right) - \underset{\approx}{\boldsymbol{M}}(\tau) : \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}(t) - \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}(\tau)\right)\right][1 - H(t-\tau)] \end{cases}$.

$H(x)$ représente la fonction d'Heaviside (fonction échellon prennant pour valeur 0 pour x négatif et 1 pour x positif). Même si le comportement viscoplastique est non linéraire, il est possible d'introduire un milieu linéaire de comparaison comme le propose **Ponte Castaneda** [Ponte Castaneda, 1991] avec l'approche variationnelle. Ensuite, la relation 19 peut se linéariser en utilisant le produit de convolution de Stieljes comme pour le cas viscoélastique linéaire selon :

$$\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}(t) = \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{M}}_{\tau} \otimes \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}\right](t,\tau) + \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^0(t,\tau) \tag{20}$$

où $\left[\underset{\approx}{\boldsymbol{M}}_{\tau} \otimes \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}\right](t,\tau) = \frac{d}{dt}\left(\int_0^t \underset{\approx}{\boldsymbol{M}}_{\tau}(\tau, t-u) : \sigma(u)du\right)$ et $\underset{\approx}{\boldsymbol{M}}_{\tau}(\tau,t) = \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{M}}(\tau)t$. Le problème élasto-viscoplastique hétérogène se ramène à un problème thermo-élastique linéaire. On cherche alors un MHE sous la même forme [Masson and Zaoui, 1999] :

$$\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{E}}}(t) = \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{M}}^{eff}_{\tau} \otimes \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}\right](t,\tau) + \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{E}}}^0(t,\tau) \tag{21}$$

Le problème est résolu à chaque incrément t en utilisant plusieurs temps intermédiaire τ_i pour évaluer le tenseur de complaisance viscoplastique aux temps précédents. De nombreux aller-retour entre l'espace de Laplace et l'espace temporel doivent être réalisés afin de résoudre un problème hétérogène thermo-élastique linéaire symbolique. La transformée inverse peut se faire par des approches numériques (type collocation) ou par méthode directe sous certaines hypothèses.

Approche par variables internes

Une autre proposition consiste à supposer que le comportement à l'instant t ne dépend que de l'état du matériau à cet instant. Les effets d'histoire sont alors stockés dans les variables internes du modèle. Le premier modèle proposé dans cette catégorie est celui de **Weng** (développé pour l'étude du fluage stationnaire des polycristaux dans [Weng, 1981]). L'idée est de supposer que la déformation viscoplastique en un point géométrique peut s'exprimer par le biais d'une fluctuation autour d'une valeur globale, qui est libre de contrainte au sens d'**Eshelby**. La relation d'interaction qui découle de cette hypothèse de travail est similaire à celle proposée par **Kröner** et que nous avons appelé « KBW » dans ce manuscrit. De nombreux auteurs ont expliqué les limites de ce modèle, qui tend vers la borne de **Taylor** pour une forte déformation plastique [Zaoui, 1997].

Pour tenir compte à la fois des interactions élastiques et viscoplastiques intergranulaires, le modèle de **Molinari et al** consiste à « additionner » les résultats asymptotiques des problèmes

purement élastique et purement viscoplastique [Molinari et al., 1997] (et les travaux précédents [Kouddane et al., 1994]). La loi de transition d'échelle s'écrit :

$$\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^g - \underset{\sim}{\dot{E}} = \left(-\underset{\approx}{\Gamma}^{C^{-1}} + \underset{\approx}{C}^{eff}\right)^{-1} : (\underset{\sim}{\dot{\sigma}}^g - \underset{\sim}{\dot{\Sigma}}) + \left(-\underset{\approx}{\Gamma}^{L_{tg}{}^{-1}} + \underset{\approx}{L}^{eff}_{tg}\right)^{-1} : (\underset{\sim}{\sigma}^g - \underset{\sim}{\Sigma}) \tag{22}$$

avec $\underset{\approx}{\Gamma}^C_{ijkl} = -\frac{1}{2}\int_V \left(\underset{\approx}{G}^C_{ik,jl}(\underline{x}-\underline{x}') + \underset{\approx}{G}^C_{jk,il}(\underline{x}-\underline{x}')\right) dV'$ représente le tenseur de Green modifié pour le problème hétérogène associé à un comportement élastique $\underset{\approx}{C}^{eff}$. De même pour $\underset{\approx}{\Gamma}^{L_{tg}}$ qui représente le tenseur de Green modifié associé à un comportement viscoplastique $\underset{\approx}{L}^{eff}_{tg}$. La partie viscoplastique du comportement local est linéarisée en utilisant une décomposition de Taylor à l'ordre un autour de $\underset{\sim}{\dot{E}}$ permettant d'écrire [Molinari et al., 1987] :

$$\underset{\sim}{\sigma}^g = \underset{\approx}{L}^g_{tg}(\underset{\sim}{\dot{E}}) : \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^g + \underset{\sim}{\sigma}^0(\underset{\sim}{\dot{E}}) \tag{23}$$

où $\underset{\approx}{L}^g_{tg}$ représente le module tangent viscoplastique. Ce type de relation d'interaction a été simplifié par **Abdul-Latif et al** dans le cas d'un matériau isotrope incompressible en introduisant un paramètre à identifier α [Abdul-Latif et al., 1998, Dingli et al., 2000]. La relation 22 devient :

$$\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^g - \underset{\sim}{\dot{E}} = 2A : (\underset{\sim}{\dot{\sigma}}^g - \underset{\sim}{\dot{\Sigma}}) + B\, trace\,(\underset{\sim}{\dot{\sigma}}^g - \underset{\sim}{\dot{\Sigma}})\,\underset{\approx}{I} - \alpha\,(\underset{\sim}{s}^g - \underset{\sim}{S}) \tag{24}$$

avec $A = \dfrac{-(8\mu+3\lambda)}{2\mu(14\mu+9\lambda)}$, $B = \dfrac{(6\mu+\lambda)(8\mu+3\lambda)}{\mu(448\mu^2+456\mu\lambda 108)}$ et $\underset{\sim}{s}^g$ respectivement $\underset{\sim}{S}$ représente la partie déviatorique du tenseur des contraintes locales et globales. Une comparaison de ce dernier modèle avec la règle en β a été effectuée dans [Evrard, 2008] pour un acier inoxydable. Pour différents chargements complexes (traction-compression/torsion), les deux modèles semblent en bon accord avec les essais expérimentaux.

Dans les méthodes décrites précédemment, il n'y a pas de couplage entre les solutions purement élastique et purement plastique, ce qui revient à considérer que pour un milieu hétérogène composé de phases avec un milieu maxwellien, le milieu homogène équivalent aura également un comportement maxwellien, ce qui est contradictoire avec les résultats de **Suquet** précédemment discutés. Pour introduire un couplage, un schéma auto-cohérent non-conventionnel a été proposé en utilisant des opérateurs de projection particuliers et la notion de « champ translaté » [Paquin et al., 1999, Paquin et al., 2001]. Les deux résultats asymptotiques élastique et viscoplastique sont alors translatés selon :

$$\begin{cases} \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{\mathrm{ge}} &= \underset{\approx}{A}^g_C : \underset{\sim}{\dot{X}}^e + \partial\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{\mathrm{ge}} \\ \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{\mathrm{gvp}} &= \underset{\approx}{A}^g_M : \underset{\sim}{\dot{Y}}^{vp} + \partial\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{\mathrm{gvp}} \end{cases} \tag{25}$$

où $\partial\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{\mathrm{ge}}$ respectivement $\partial\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{\mathrm{gvp}}$ représente une fluctuation de la déformation élastique et viscoplastique autour d'une déformation uniforme $\underset{\sim}{\dot{X}}^e$ pour le problème élastique et $\underset{\sim}{\dot{Y}}^{vp}$ pour le problème viscoplastique. En utilisant les propriétés des projecteurs dits de **Kunin**, il est possible de trouver une expression pour les deux tenseurs $\underset{\sim}{\dot{X}}^e$ et $\underset{\sim}{\dot{Y}}^{vp}$ (minimisation du terme non local utilisée par l'approche auto-cohérente). Face à la complexité de l'équation obtenue, une transition d'échelle simplifiée a été proposée par **Sabar et al** en translatant uniquement la solution purement viscoplastique et en définissant uniquement le projecteur de **Kunin** élastique [Sabar et al., 2002, Berbenni, 2002]. La relation s'écrit :

$$\underset{\sim}{\dot{\sigma}}^{\mathrm{g}} = \underset{\approx}{B}^g_E : \left[\underset{\sim}{\dot{\Sigma}} + \underset{\approx}{C}^{eff} : (\underset{\approx}{I} - \underset{\approx}{S}) : (\underset{\approx}{A}^g_B : \underset{\sim}{\dot{E}}^{vp} - \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{\mathrm{gvp}})\right] \tag{26}$$

où $\underset{\approx}{\boldsymbol{A}}^g_B = \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : (\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{eff^{-1}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^g)\right]^{-1}$. Il s'avère que le champ uniforme cherché $\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{Y}}}^{vp}$ n'est autre que le taux de déformation viscoplastique effectif. Il est important de mentionner que jusqu'à présent, une linéarisation sécante du comportement viscoplastique local était supposée. Récemment, une linéarisation affine du comportement viscoplastique local a été introduite dans l'approche à champ translaté [Mareau and Berbenni, 2015].

D'autres voies ont été explorées pour résoudre le problème hétérogène mais ne seront que citées dans cette annexe car elles sont utilisées plus couramment pour les matériaux composites. Le problème est en effet de nature différente, en raison du nombre de phases à considérer (souvent plus faible que pour le cas des polycristaux) et du comportement mécanique, qui est souvent très contrasté entre les inclusions et la matrice (par rapport aux polycristaux où le contraste ne provient que de l'anisotropie du comportement local). Premièrement les approches TFA (Transformation Field Analysis) développées par **Dvorak** [Dvorak, 1992, Dvorak et al., 1994] supposent des redistributions élastiques de la déformation (ou de la contrainte) dans des sous-volumes du matériau. Concrètement, chaque phase cristallographique est découpée à nouveau en sous-volumes dans lesquels le champ est supposé uniforme. La relation de transition d'échelle est définie selon :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^i = \underset{\approx}{\boldsymbol{A}}^i : \underset{\sim}{\boldsymbol{E}} + \sum_j \underset{\approx}{\boldsymbol{D}}^{i,j} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\mu}}^j \tag{27}$$

où $\underset{\approx}{\boldsymbol{A}}^i$ représente le tenseur de localisation élastique pour le sous-volume i et $\underset{\approx}{\boldsymbol{D}}^{i,j}$ sont des tenseurs d'influence de la déformation inélastique μ_j sur le sous-volume i. Ces tenseurs d'influence sont à recaler numériquement à partir de simulations éléments finis. La méthode a été étendue à des déformations inélastiques non uniformes μ_i dans chaque sous-volume par [Michel and Suquet, 2009] : on parle de Nonuniform Transformation Field Analysis (NTFA). D'autre part, le modèle proposé par **Lahellec** et **Suquet** permet d'étendre les formulations du second ordre à l'élasto-viscoplasticité [Lahellec and Suquet, 2007a, Lahellec and Suquet, 2007b]. Basé sur une écriture thermodynamique du problème selon :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{\partial w}{\partial \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}(\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}, \underset{\sim}{\boldsymbol{\alpha}}_i), \quad \frac{\partial w}{\partial \underset{\sim}{\boldsymbol{\alpha}}_i}(\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}, \underset{\sim}{\boldsymbol{\alpha}}_i) + \frac{\partial \phi}{\partial \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\alpha}}}_i}(\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\alpha}}}_i) = 0 \tag{28}$$

où w représente une énergie libre, $\underset{\sim}{\boldsymbol{\alpha}}_i$ représente un jeu de variables internes et ϕ est le potentiel dissipatif associé aux variables internes $\underset{\sim}{\boldsymbol{\alpha}}_i$. Les équations sont ensuite discrétisées en temps en utilisant un schéma Euler implicite. Pour chaque incrément, l'approche variationnelle est utilisée pour trouver un potentiel effectif, en résolvant un problème de minimisation de l'énergie libre sur l'incrément. Une version simplifiée du modèle a été proposée dans [Badulescu et al.,] et appliquée au cas d'un polycristal non texturé.

ANNEXE 5

Plan de l'éprouvette cruciforme utilisée pour les essais biaxiaux

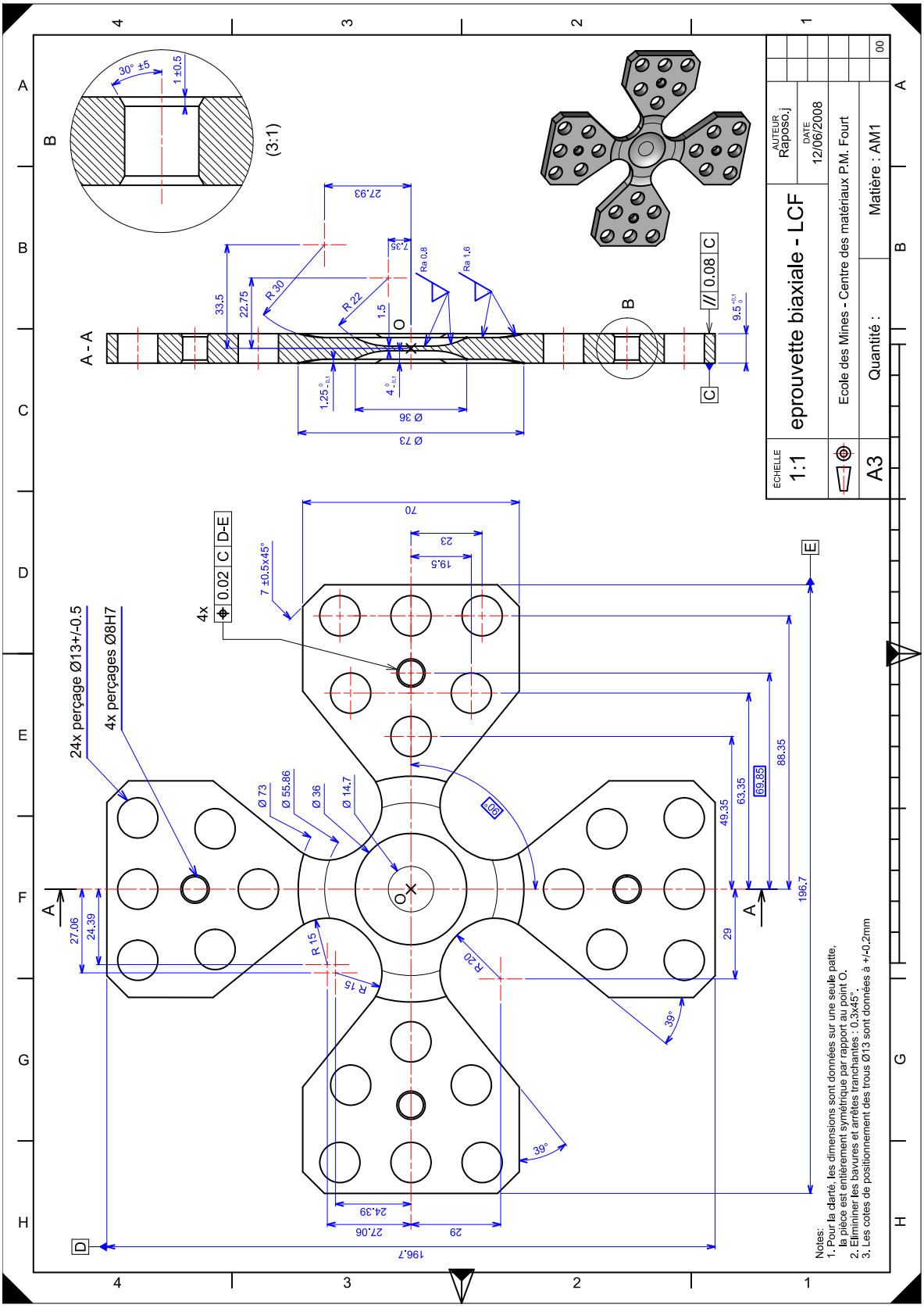


Figure .8 – *Plan d'usinage de l'éprouvette cruciforme en DS200+Hf réalisée au Centre des matériaux de Mines ParisTech.*

Résumé

De nombreuses études ont permis de développer des modèles de plasticité cristalline rendant compte de l'anisotropie d'un monocristal. Les matériaux à solidification dirigée (DS) peuvent être simulés avec des modèles semblables, sous réserve de connaître la morphologie et l'orientation cristallographique des grains contenus dans la pièce. Pour éviter ces analyses microstructurales coûteuses, il est possible de développer des approches, déterministes ou analysant les dispersions de la réponse sur un lot de « pièces synthétiques » résolues par la méthode des éléments finis. Dans cette étude, nous avons tenté d'apporter les outils nécessaires aux deux types de modélisation. Avant tout, un modèle du monograin de DS200+Hf a été identifié pour une gamme de température allant de l'ambiante à 1200°C. Ensuite, plusieurs montées d'échelle ont été envisagées, d'abord sur un volume élémentaire représentatif (VER) puis sur une structure tridimensionnelle (éprouvette cruciforme). Sur le VER, la réponse de plusieurs modèles micromécaniques a été confrontée à des calculs de référence utilisant la méthode des éléments finis. Puis, le comportement mécanique d'une éprouvette cruciforme en DS200+Hf a été étudié, en réalisant des essais expérimentaux biaxiaux qui, ensuite, ont permis d'évaluer les prévisions du modèle. Ces résultats amènent à s'interroger sur la modélisation adaptée aux structures oligogranulaires (i.e. constituées d'un faible nombre de grains) : faut-il mailler explicitement l'échelle locale (les grains) dans la structure ou malgré la non-séparabilité des échelles, le modèle homogénéisé continue-t-il de fournir des résultats satisfaisants ?

Mots Clés

Structures oligogranulaires, modélisations multi-échelles, essais biaxiaux cruciformes, superalliages base nickel.

Abstract

Various studies were aimed at developing crystal plasticity models to account for the anisotropic mechanical behaviour of single crystals. Directionally solidified (DS) materials can be modeled using such approaches, taking into account the underlying crystallographic structure. It requires the knowledge of the position, shape and crystallographic orientations of grains. To prevent heavy microstructure analyses, other models have to be developed for industrial calculations, using homogenization theory or considering a batch of synthetic pieces calculated using Crystal Plasticity Finite Elements Method (CPFEM). The aim of this thesis is to bring computational tools to carry out the two types of modeling for industrial applications. First of all, a crystal plasticity model for one grain of DS200+Hf is defined ranging from room temperature to 1200°C. Some scale transition rules, using full-field or mean-field approaches, are studied first in the theoretical case of a representative volume element (RVE) and then on tri-dimensional structures in order to access overall and local responses. For the RVE responses, micromechanical models are compared with a reference produced by CPFEM for various loadings. Moreover, the mechanical behaviour of a DS200+Hf cruciform specimen is studied. Biaxial tests with digital image correlation allow us to check the model predictions. These results raise questions about the modeling of oligogranular structures (i.e. with a small number of grains): should it be accepted that the local scale must be explicitly meshed, or, despite the fact that scale separability is not ensured, can we consider that the homogenized model still produces reliable results?

Keywords

Oligogranular structures, multi-scale modeling, biaxial cruciform tests, nickel-base superalloys.