

Etude numérique de l'influence d'hétérogénéités microstructurales sur les contraintes résiduelles induites par choc laser

Lucas Lapostolle

► To cite this version:

Lucas Lapostolle. Etude numérique de l'influence d'hétérogénéités microstructurales sur les contraintes résiduelles induites par choc laser. Mécanique des matériaux [physics.class-ph]. HESAM Université, 2022. Français. NNT: 2022HESAE053. tel-04042509

HAL Id: tel-04042509 https://pastel.hal.science/tel-04042509

Submitted on 23 Mar 2023 $\,$

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.

HESAM UNIVERSITÉ



ÉCOLE DOCTORALE SCIENCES ET MÉTIERS DE L'INGÉNIEUR Procédés et Ingénierie en Mécanique des Matériaux - Campus de Paris

THÈSE

présentée par : Lucas LAPOSTOLLE soutenue le : 23 Novembre 2022

pour obtenir le grade de : Docteur d'HESAM Université

préparée à : École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers Spécialité : Mécanique - Matériaux (AM)

Etude numérique de l'influence d'hétérogénéités microstructurales sur les contraintes résiduelles induites par choc laser

THÈSE dirigée par : M. Olivier CASTELNAU

et co-encadrée par : M. Léo MORIN, Mme. Katell DERRIEN

Jury			
M. Samuel FOREST	Dir. de Recherche, Centre des Maté- riaux, Mines Paris	Président	Т
M. Nicolas JACQUES	MdC HDR, IRDL, ENSTA Bretagne	Rapporteur	тт
Mme Emmanuelle ROUHAUD	Professeure, Université de Technolo-	Rapporteure	н
	gie de Troyes		È
M. Olivier CASTELNAU	Dir. de Recherche, PIMM, ENSAM	Examinateur	
Mme. Katell DERRIEN	MdC, PIMM, ENSAM	Examinatrice	S
M. Romain ECAULT	Ingénieur recherche, Airbus Opéra-	Examinateur	
	tions, Airbus		E
M. Léo MORIN	MdC, PIMM, CNAM	Examinateur	
M. Thierry PALIN-LUC	Professeur, I2M, ENSAM	Examinateur	

A mes parents, beaucoup de choses ont été nécessaires pour que j'en sois ici aujourd'hui, vous êtes la plus importante d'entre elles.

Remerciements

Ce manuscrit se pose comme un marqueur du travail de thèse effectué durant trois ans. Il s'agit d'une aventure dans laquelle je me suis engagé initialement non sans appréhension, mais que je considère au moment d'écrire ces lignes comme une des meilleures décisions que j'ai pu prendre.

Ce travail de thèse repose sur un ensemble d'éléments, chacun indispensable. Je réalise en tout particulier la chance d'avoir pu bénéficier d'un encadrement d'une telle qualité. A eux trois, Katell Derrien, Léo Morin et Olivier Castelnau ont permis de ne laisser aucun, ou très peu, d'angles morts face aux questions, interrogations, et difficultés auxquelles j'ai pu faire face, et ce de manière décuplée grâce à leur qualités pédagogiques et humaines. Merci à Léo Morin pour ta patience et ta bienveillance, pour tes conseils précieux, qu'ils concernent le contenu scientifique et le travail de recherche de manière générale. J'espère que nos chemins de chercheurs se recroiseront à l'avenir. Je remercie énormément Katell Derrien, pour tous les petits cours particuliers dont j'ai pu régulièrement bénéficier durant la thèse, pour ton regard critique sur le travail qui en a renforcé la qualité. Je souhaite également exprimer le bonheur et le soulagement d'avoir pu partager avec quelqu'un le plaisir de s'attaquer à un problème à coup de stylos, de brouillons et de lignes de codes à répétition. Un autre plaisir de la thèse était celui de pouvoir rentrer dans le bureau d'Olivier Castelnau et le trouver souriant et ravi de discuter, ce qui permettait souvent de lever un peu mon nez du guidon et de prendre de la perspective par rapport aux différents aspects du travail en question. Des remerciements en particulier pour m'avoir permis de jouer au touriste curieux au synchrotron Soleil, et pour l'aide apportée pour préparer l'après-thèse. S'il ne bénéficie pas du titre d'encadrant officiel, je ne considère pas différemment Laurent Berthe, dont l'enthousiasme et l'énergie ont maintes fois dissipé les moments de doutes que l'on rencontre durant une thèse. Je garde un excellent souvenir de l'école thématique d'Oléron, et de la communauté laser que j'ai pu entrevoir là-bas à cette occasion. Dure était la rédaction de ce paragraphe, où chaque adjectif utilisé pour les personnes mentionnées est valable pour les autres. Mais il fallait cependant choisir. Je m'adresse directement à eux dans l'éventualité où ils viendraient à douter de la qualité de leur encadrement, à qui je souhaite alors dire de ne rien changer par rapport à ce dont j'ai la chance inouïe de bénéficier.

Ma gratitude va également vers les membres du jury : Samuel Forest, Nicolas Jacques, Emmanuelle Rouhaud, Romain Ecault et Thierry Palin-Luc pour avoir accepté d'en faire partie, pour la lecture du manuscrit, et pour avoir fait de ma soutenance un moment bien plus agréable que ce à quoi un doctorant peut s'attendre. Il s'agit d'un jour dont je me rappellerai chaque instant avec plaisir.

Je remercie également de manière générale le projet ANR FORGELASER dans lequel s'inscrit cette thèse, et tous ses acteurs. Ce projet a permis de donner à ma thèse le cadre dont j'avais besoin, à savoir un sujet non sans connexion avec des problématiques industrielles, mais une grande liberté dans la manière de l'approcher, même quand ces dernières pouvaient paraître distantes des applications.

REMERCIEMENTS

Le travail présenté dans ce manuscrit est de nature exclusivement théorique et numérique. Des tentatives de manipulations expérimentales ont tout de même été effectuées. Je souhaite alors remercier Chedly Braham pour son aide précieuse et indispensable pour la préparation et l'élaboration de mesures de diffractions des rayons X, ainsi que Vincent Michel, avec qui j'ai également apprécié nos nombreuses discussions durant les déjeuners. Les résultats expérimentaux n'ont pas été tout à fait conformes à nos attentes pour ainsi dire, mais j'ai été tout de même très heureux d'essayer. Je remercie de même Thierry Baudin pour nous avoir transmis des échantillons laminés, bien que n'ayons pas été capables d'en tirer ce que nous imaginions.

Si les aspects scientifiques et humains des membres permanents du laboratoire que la thèse peut amener à côtoyer sont primordiaux, ils doivent être complétés par l'ambiance générale de travail, qui est une autre manière pour moi de désigner l'entente avec les doctorants. De nouveau, je mesure la chance dont j'ai bénéficié de pouvoir réaliser ma thèse en même temps que les personnes que j'ai côtoyé durant ces trois années. Impossible de ne pas commencer par mes frères et soeurs d'armes du bâtiment Manet, (sacré) Pouya Tajdary, Antoine Clement et Sidonie Pinaroli. Je suis heureux de tout ce que nous avons partagé (déjeuners, discussions, cinémas, jeux de sociétés, boissons houblonnées), mon bureau n'était certes pas le même que le vôtre, mais mon coeur y était. Je me suis retrouvé par mon sujet un cousin des doctorants du bureau laser, que j'ai alors considéré comme ma deuxième maison. Un grand merci donc à ses habitants : Maxime Guerbois (pour le week-end de surf, et aussi pour les coups de mains indispensables avec le laser et le polissage); Selen Unaldi, my dear mama qui a toujours su me rassurer quand le besoin apparaissait; Marine Scius Bertrand, qui a lancé la passion de l'escalade; Corentin le Bras, toujours là en cas de question et pour transmettre la connaissance du puppet yoda; (grand chef) Mohammad Ayad, qui m'a beaucoup appris et apporté, et avec qui j'ai eu un véritable plaisir de travailler. Je n'oublie pas les autres habitants : Julien Daligault (futur successeur d'Adam Ondra, sous bien des aspects) Jason Guy, Julien Rods (mon pote), Lucas FF, Gwenaëlle Chebil et Dimitri Goutaudier, ami calculeux (et également surfeur) perdu au milieu des expérimentateurs. Je ne m'arrête pas ici et continu avec d'autres formidables personnes : Caroline Vibert (qui me prête très généreusement les qualités qu'elle possède déjà elle-même), Sara Zanchi, Xavier Mackré (for Frodo!), Simon Lottier (tant pis pour les leçons de batterie mais cela aurait été avec grand plaisir), Rachel Azulay, Raphaël Arquier et Gwladys le Simple. Impossible bien entendu de ne pas remercier l'ADDAM (pour laquelle j'ai fini par cotiser) notamment pour ce fabuleux séminaire des doctorants, et tous les membres (même éphémères) du groupe d'escalade. Merci également à Cédric Sénac et Marco Ezequiel, heureuses rencontres hors du cadre du laboratoire. Enfin, merci à Vincent Jacquemain, pour l'accueil au synchrotron, ta sympathie et tes encouragements à l'approche de ma soutenance. Je suis conscient que ce texte ne fait pas assez honneur aux gens cités, et encore plus à tous ceux qui ne le sont pas et le mériteraient. A toutes ces personnes, vous êtes indissociables du souvenir précieux que je garde de ma thèse.

Je remercie enfin très profondément mes parents, qui, bien au-delà de m'avoir logé et nourri pendant ces trois années, ont su réunir les conditions me permettant d'en être ici aujourd'hui. Mon rôle a été de capitaliser sur cette lancée qui m'a été donnée, et que j'ai eu la chance d'avoir.

Résumé

Cette thèse traite de la modélisation et simulation du procédé de grenaillage laser, ou Laser Shock Peening (LSP). Ce procédé vise à introduire des contraintes résiduelles de compression à la surface d'un matériau par impact laser afin d'améliorer son comportement en fatigue. Cette technique est particulièrement utilisée dans le domaine aéronautique. La simulation du grenaillage laser est maintenant étudiée depuis une trentaine d'années, et est aujourd'hui à même de prédire de manière pertinente le comportement macroscopique du matériau. Les matériaux traités par grenaillage laser sont des alliages métalliques, constitués d'une microstructure localement anisotrope, sous la forme d'agrégats de grains. Cet aspect n'est pas pris en compte dans la plupart des simulations de choc laser, qui considèrent des matériaux isotropes homogènes. Nous avons tenu compte dans cette thèse des microstructures spécifiques des agrégats polycristallins dans la modélisation des matériaux utilisés, afin d'en étudier l'influence sur les champs mécaniques générés.

Ce manuscrit est divisé en quatre chapitres. Le premier chapitre vient présenter un état de l'art du procédé du choc laser, des modèles et techniques nécessaires à sa modélisation, et enfin des simulations du procédé. Dans le deuxième chapitre, nous présentons une méthodologie de modélisation et de simulation en une dimension du grenaillage laser pour un matériau homogène, pouvant être étendue aisément à un matériau hétérogène. Cette méthodologie est entre autre utilisée pour développer un outil de simulation rapide du choc laser. Le troisième chapitre est une étude de la propagation d'une onde de contrainte élasto-plastique dans un matériau laminé, qui est une microstructure idéalisée mais permettant déjà d'observer les principaux effets de l'hétérogénéité du matériau sur les champs mécaniques. Une démarche d'homogénéisation statique est menée afin de décrire quantitativement ces effets. Enfin, le quatrième chapitre traite de la propagation d'une onde de contrainte en champ complet dans une microstructure polycristalline. Un modèle de plasticité cristalline est alors utilisé.

Mots-clés : Grenaillage laser, Contraintes résiduelles, Onde de contrainte, Microstructure, Matériau laminé, Polycristal, Plasticité cristalline.

Abstract

This thesis deals with the modeling and simulation of the Laser Shock Peening (LSP) process. This process aims at introducing compressive residual stresses on the surface of a material by laser impact in order to improve its fatigue behavior. This technique is particularly used in the aeronautical field. The simulation of laser shock peening has been studied for about thirty years, and is now able to predict rather accurately the macroscopic behavior of the material. The materials treated by laser shock peening are metallic alloys, composed of a locally anisotropic microstructure, in the form of aggregates of grains. This aspect is not taken into account in most laser shock simulations, which consider homogeneous macroscopic materials. In this thesis, we introduced microstructures typical of polycrystaline grain agregates in the modeling of the materials used, in order to study its influence on the mechanical fields generated.

This manuscript is divided into four chapters. The first chapter presents the state of the art of the laser shock process, the models and techniques required for its modeling, and finally the simulations of the process. In the second chapter, we present a methodology for modeling and simulating the laser shock peening in one dimension for a homogeneous material, but which can be easily extended to a heterogeneous material. This methodology is used to develop a numerical tool providing fast simulations of the laser shock. The third chapter is a study of the propagation of an elasto-plastic stress wave in a laminated material, which is an idealized microstructure but which already allows to observe the main effects of the material heterogeneity on the mechanical fields. A static homogenization procedure is performed to describe quantitatively these effects. Finally, the fourth chapter deals with the propagation of a full field stress wave in a polycrystalline microstructure. A crystal plasticity model is thus used.

Keywords : Laser Shock Peening, Residual stress, Stress wave, Microstructure, Laminated material, Polycrystal, Crystal plasticity.

Table des matières

R	emerc	ciement	S		v	
R	ésumé	Ś			ix	
A	bstract x					
Li	ste de	es table	aux		xix	
Li	ste de	es figur	es		1	
In	trodu	iction g	énérale		3	
1	Con	texte e	t état de	l'art	7	
	1.1	Conte	xte		8	
	1.2	Traite	ment de	surface par grenaillage laser	10	
	1.3	Comp	ortement	à hautes vitesses de déformations \hdots	14	
		1.3.1	Équatio	ns d'état	14	
		1.3.2	Modèles	s de plasticité	16	
	1.4	Comp	ortement	mécanique d'un polycristal et d'une microstructure \hdots	19	
		1.4.1	Compo	rtement élastique d'un grain	19	
		1.4.2	Modélis	ation du comportement plastique d'un grain	20	
			1.4.2.1	Lois de comportement avec seuil	21	
			1.4.2.2	Lois de comportement visco-plastique	22	
			1.4.2.3	Plasticité cristalline et écrouissage	23	
		1.4.3	Modélis	ation géométrique d'un polycristal	24	
	1.5	Mesur	es de vite	esse en face arrière par VISAR	25	
	1.6	Quelq	ues résult	tats théoriques sur le choc laser	27	
	1.7	Simula	ations nu	mériques du grenaillage laser	30	
		1.7.1	Modélis	ation par Elements Finis du choc laser	30	

		1.7.2	Etudes	numériques de l'influence des paramètres du choc laser	32
		1.7.3	Prise en	compte de la nature cristalline du matériau	36
	1.8	Métho	odes nume	ériques pour la propagation d'ondes de contraintes	42
		1.8.1	Schéma	numérique intégré au code commercial ABAQUS/Explicit	42
		1.8.2	Méthod	es basées sur les différences finies	43
			1.8.2.1	Schéma de Lax-Friedrichs	44
			1.8.2.2	Schéma de Lax-Wendroff	44
			1.8.2.3	Schéma de Godunov	44
			1.8.2.4	Schéma de Godunov à haute résolution	45
	1.9	Concl	usion du	chapitre et objectifs de la thèse	46
2	Mod	lélisatio	on et sim	llation de la propagation d'une onde de contrainte dans un matériau ho-	
	mog	ène éla	sto-plasti	que	49
	2.1	Introd	luction .		50
	2.2	Modèl résidu	le 1D pou elles indu	r la propagation des ondes de contrainte et le champ de contraintes it	52
		2.2.1	Compor	tement mécanique	52
		2.2.2	Propaga	tion d'une onde de contrainte \ldots	54
			2.2.2.1	Equation de propagation d'une onde de contrainte dans une configu- ration axisymétrique	54
			2.2.2.2	Propagation élastique	55
			2.2.2.3	Correction plastique	57
		2.2.3	Modélis	ation des contraintes résiduelles	58
	2.3	Simula	ations de	vitesses en face arrière	60
		2.3.1	Présenta	ation des simulations	60
		2.3.2	Résulta	зв	62
	2.4	Cham	ps résidu	els induits par la propagation de l'onde de contrainte	64
		2.4.1	Présenta	ation des simulations	64
		2.4.2	Résulta	js	66
			2.4.2.1	Champ de déformations plastiques	66
			2.4.2.2	Champ de contraintes résiduelles	68
	2.5	Discus	ssion	• • • • • • • • • • • • • • • • • • • •	70
	2.6	Concl	usion .		73
	-				-
3	Mod	lélisatio	on et sim	llation de la propagation d'une onde de contrainte dans un matériau hé-	
	téro	gene él	asto-plast	ıque	75
	3.1	Introd	luction.		76

	3.2	Modél	lisation mécanique d'ondes de contrainte dans un matériau laminé	78
		3.2.1	Equations élasto-plastique	78
		3.2.2	Cas uniaxial	79
		3.2.3	Equation de l'onde de contrainte	81
			3.2.3.1 Propagation élastique	81
			3.2.3.2 Propagation plastique	82
	3.3	Homo	généisation élasto-plastique d'un matériau laminé dans des conditions quasi-statiques	3 83
		3.3.1	Tenseur des rigidités effectif	83
		3.3.2	Tenseur des déformations plastiques effectif	84
		3.3.3	Comportement élasto-plastique effectif incrémental	85
	3.4	Simula	ation numérique de la propagation d'une onde de choc dans un matériau élasto-	
		plastic	que laminé	88
		3.4.1	Implémentation numérique	88
		3.4.2	Description des simulations	88
			3.4.2.1 Simulation de la propagation de l'onde de contrainte	90
			3.4.2.2 Simulation du champ de déformation plastique axiale	93
		3.4.3	Propagation de l'onde de contrainte axiale estimée par le modèle MHE	97
		3.4.4	Hétérogénéité des champs locaux de déformation plastique estimée par le modèle MHE	99
		3.4.5	Champ moven des déformations plastique estimé par le modèle MHE	101
		346	Commentaires sur les conditions de chargement	104
	3.5	Discus	ssion	104
	3.6	Concl		106
	0.0	Coner		100
4	Mod	lélisatio	on et simulation de la propagation d'une onde de contrainte et des contraintes rési-	r.
	duel	lles en j	plasticité cristalline	109
	4.1	Introd	luction	110
	4.2	Modèl	le de polycristal	111
		4.2.1	Modélisation géométrique d'un polycristal	111
		4.2.2	Comportement élastique d'un grain	114
		4.2.3	Description du comportement plastique	115
	4.3	Modél plastic	lisation en deux dimensions de la propagation d'une onde de contrainte élasto- que	117
		-4.3.1	Modélisation en déformation plane	118
		4.3.2	Équation de propagation d'une onde de contrainte en deux dimensions	119
		4.3.3	Méthodes numériques pour la simulation de la propagation d'une onde de contrainte	es
			en deux dimensions	122

		4.3.4	Traitem	ent numérique de la plasticité cristalline	124
			4.3.4.1	Mise en équation	124
			4.3.4.2	Exemple sur un chargement en traction/compression en 0D	125
	4.4	Calcul	numériq	ue des contraintes résiduelles	126
	4.5	Micros	structures	s simples : cas d'un monocristal et d'un bicristal $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	131
		4.5.1	Cas d'u	n monocristal	132
		4.5.2	Cas d'u	n bicristal	138
	4.6	Déforr	nations p	lastiques et contraintes résiduelles induites par choc laser dans un poly-	
		cristal	••••		140
		4.6.1	Effet de	la microstructure	140
		4.6.2	Approch	ne statistique des simulations en plasticité cristalline	145
			4.6.2.1	Description de l'approche statistique	146
			4.6.2.2	Champ de déformation plastique dans un polycristal	147
			4.6.2.3	Champ de contraintes résiduelles dans un polycristal	149
		4.6.3	Influenc	e de la taille moyenne des grains	151
			4.6.3.1	Influence de la taille moyenne des grains sur le champ de la déformation	151
			1629	Influence de la taille menuence des mains sur la vitages en face amière	151
	4 7	Conel	4.0.3.2	finituence de la tame moyenne des granis sur la vitesse en face arrière	150
	4.1	Conch			109
Co	onclus	ion gén	iérale et j	perspectives	161
\mathbf{A}	Étuc	le des r	néthodes	analytiques et numériques pour la propagation d'onde de contrainte	165
	A.1	Propa	gation d'	une onde de contrainte élastique dans un matériau homogène	166
		A.1.1	Paramè	tres du modèle	166
		A.1.2	Solution	u numérique	167
	A.2	Propa	gation d'	une onde de contrainte élastique dans un matériau hétérogène	168
		A.2.1	Paramè	tres du modèle	168
		A.2.2	Solution	analytique	168
		A.2.3	Solution	u numérique	170
	A.3	Propa			172
			gation d'i	une onde de contrainte élasto-plastique dans un matériau homogène	114
		A.3.1	gation d'i Paramè	une onde de contrainte élasto-plastique dans un matériau homogène tres du modèle	172
		A.3.1 A.3.2	gation d'i Paramè Cas d'u	une onde de contrainte élasto-plastique dans un matériau homogène tres du modèle	172 172 172
		A.3.1 A.3.2	gation d'i Paramè Cas d'u A.3.2.1	une onde de contrainte élasto-plastique dans un matériau homogène tres du modèle	172172172172172
		A.3.1 A.3.2	gation d'i Paramèt Cas d'ui A.3.2.1 A.3.2.2	une onde de contrainte élasto-plastique dans un matériau homogène tres du modèle	 172 172 172 172 172 174

			A.3.3.1	Solution analytiq	ue							176
			A.3.3.2	Solution numériq	ue							178
		A.3.4	Compara	aison des méthode	s de calcul de	e la plastici	té					179
	A.4	Conclu	usion									181
Lis	ste de	es annex	tes									165
в	Mod	lèle élas	to-plastic	ue effectif								183
	B.1	Tenset	ır des rigi	dités effectif $\widetilde{\mathbb{C}}$								183
	B.2	Modèl	e plastiqu	e effectif								184
		B.2.1	Une seul	e phase plastifie .								185
		B.2.2	Toutes le	es phases plastifier	nt							186
С	Valie	dation o	lu calcul	des contraintes ré	ésiduelles : a	pplication a	au cas d	une in	clusio	n the	ermo	-
	élast	ique										189
	C.1	Descri	ption du	problème								189
	C.2	Résult	ats des si	mulations								191
Bi	bliogr	raphie										195

Liste des tableaux

1.1	Paramètres du modèle de Johnson-Cook obtenus pour l'aluminium AA7075-T6 selon que l'onde de choc se propage dans une section ou dans l'épaisseur de l'échantillon [14].	36
2.1	Paramètres matériaux pour les simulations selon les références précisées	61
2.2	Maillages utilisés pour les calculs EF	66
3.1	Valeurs des paramètres des matériaux considérés pour les simulations	89
3.2	Valeurs des paramètres des matériaux considérés pour les simulations supplémentaires.	90
4.1	paramètres élasto-visco-plastiques pour l'Aluminium AA1050 [201]	132
A.1	Valeurs de contraintes et vitesses du diagramme $x - t$ de la Figure A.2 [18]	170
A.2	Valeurs de contraintes et vitesses du diagramme $x - t$ de la Figure A.5	174
A.3	Valeurs de contraintes et vitesses du diagramme $x - t$ de la Figure A.8 [18]	178

Table des figures

1	Illustration de rupture par fissuration dues à la fatigue. (a) Illustration de la fissuration d'un essieu de wagon de train [78]. (b) Photo du fuselage intérieur d'un Comet I après un test de fatigue sur la structure [12]	3
1.1	Courbes de Wöhler pour l'aluminium AL7075-T7351 non traité (untreated), traité par grenaillage (shot-peened), et traité par grenaillage laser (LSP, Laser Shock Peening) [154].	9
1.2	Illustration du procédé de grenaillage las r[87]	10
1.3	Evolution de la pression du plasma en fonction de l'intensité du laser [162]. La pression atteint un palier avec le film d'eau (points verts), contrairement à la configuration avec la cuve d'eau (points noirs et rouges).	11
1.4	Influence des effets thermiques sur les contraintes résiduelles générées par grenaillage laser [165]	11
1.5	Illustration du processus de recouvrement en LSP. (a) Illustration de la définition du taux de recouvrement. (b) Illustration d'un motif de recouvrement en zigzag	12
1.6	Comparaison de la profondeur affectée par les contraintes résiduelles de compression entre le grenaillage conventionnel et le grenaillage laser [60] sur un Inconel 718	13
1.7	Evolution de la longueur d'une fissure en fonction du nombre de cycle de sollicitation entre une éprouvette non traitée et traitée par grenaillage laser [74] sur du Magnésium AZ31B	13
1.8	Courbe d'Hugoniot, adapté de [178]. Le point (V_f, P_f) correspond à l'état final, et le point (V_H, P_H) correspond à limite d'Hugoniot à partir de laquelle le comportement du matériau devient non linéaire.	15
1.9	Comparaison entre expériences et simulations des contraintes résiduelles en profondeur obtenues par LSP pour différentes pressions et différentes lois de comportement pour le Ti-6Al-4V. (a) Comportement Elastique Parfaitement Plastique. (b) Comportement Zerilli-Armstrong. (c) Comportement Johnson-Cook	18
1.10	Formes des tenseurs de rigidité et de souplesse (en convention de Voigt) suivant le type de meille gristellegraphique [142], exprimées solon les aves gristelling	10
1 11	Illustration des surfaces souils issues de la loi de Schmid régularisée [140]	19 91
1 19	Flaboration d'une représentation de Veronei anisetrone d'une microstructure [141]	<i>4</i> 1
1.12	observation de la microstructure, (b) identification du contour des grains, (c) tesselation de Voronoi anisotrope, (d) coloration selon les orientations cristallines	25

1.13	Illustration du principe de la mesure VISAR [162]
1.14	Illustration d'une comparaison de profils de vitesse en face arrière expérimentaux et numériques [172] pour un échantillon d'Aluminium pur
1.15	Solution théorique de la propagation d'une onde de contrainte dans un matériau élas- tique parfaitement plastique soumis à un chargement en créneau. (a) Diagramme $x - t$ de la propagation élasto-plastique d'une onde de contrainte. (b) Profil spatial de la propagation d'une onde de contrainte à différents instants de la propagation (annoté à partir de [18])
1.16	Différents comportement d'un matériau sous choc en fonction de la pression appliquée et du temps écoulé, pour un acier de type 12Cr [18]
1.17	Illustration du type de maillage utilisé pour les simulations de choc laser [28] 3
1.18	Comparaison de contraintes résiduelles obtenues numériquement et expérimentalement [28]. (a) comparaison des contraintes résiduelles expérimentales et numériques en sur- face; (b) comparaison des contraintes résiduelles expérimentales et numériques dans l'épaisseur
1.19	Résultats numériques de l'influence du taux de recouvrement et du profil de recouvrement sur les contraintes résiduelles [196]. (a) Influence du motif de recouvrement sur les contraintes résiduelles en surface. (b) Influence du motif de recouvrement sur les contraintes résiduelles en profondeur. (c) Influence du taux de recouvrement sur les contraintes résiduelles en surface. (d) Influence du taux de recouvrement sur les contraintes résiduelles en profondeur
1.20	Influence de l'utilisation d'une équation d'état sur les champs résiduels de déformations plastiques et de contraintes résiduelles [44]. (a) Déformation plastique. (b) Contraintes résiduelles
1.21	Comparaisons des contraintes résiduelles de surface expérimentales et numériques, avec recouvrement, avec et sans opération de moyenne [34]
1.22	Procédé de soudage FSW et influence sur les propriétés mécaniques utiles pour la simu- lation du choc laser [14]. (a) Image EBSD d'une coupe de la soudure par FSW entre des alliages d'Aluminium AA7075 et AA2017. (b) Représentation de la variation relative des paramètres du modèle de Johnson-Cook selon les directions d'application du choc (axiale et transversale) d'un joint FSW sur différents matériaux
1.23	Cartographie de la rotation de la maille cristalline induite par un choc laser : (a) pour l'orientation (110), (b) pour l'orientation ($1\overline{10}$) [188]
1.24	Champ de rotation de la maille cristalline d'un échantillon frappé par un choc laser et composé de deux cristaux avec des orientations différentes [189]
1.25	Champ des contraintes résiduelles d'un échantillon frappé par un choc laser et composé de deux cristaux avec des orientations différentes [189]
1.26	Champ de déformation plastique équivalente avec et sans prise en compte de la micro- structure [183]

1.27	Evolution de la vitesse matérielle pour différentes distributions des orientations cristal- lines [121]. Sont représentées les réponses pour l'orientation [111], pour 50 distributions d'orientations aléatoires, et pour la moyenne de ces orientations
1.28	Comparaison entre les solutions analytiques et numériques pour la propagation d'une onde de contrainte dans un monocrystal, avec un système de glissement unique formant des angles de 10°, 30° et 45° avec la direction du choc [94]
1.29	Vitesses en face arrière obtenues par impact sur un monocristal de Magnésium selon plusieurs orientations Kanel et al. [97]
2.1	Illustration du procédé de grenaillage laser
2.2	Illustration de l'échantillon infiniment plan
2.3	Modélisation du chargement du laser adapté de [115] : (a) profil temporel de pression normalisée, (b) distribution spatiale de pression normalisée pour plusieurs diamètres de spot
2.4	Illustration du modèle EF utilisé pour le simulations de vitesse en face arrière 62
2.5	Comparaison des simulations de la vitesse en face arrière entre le modèle 1D et la solution de référence EF 3D pour les différents matériaux et trois tailles de tache laser. (a) 12Cr, (b) 316L, (c) Ti-6Al-4V et (d) Al7075-T6
2.6	Représentation du modèle EF utilisé pour les simulations du champ de contraintes ré- siduelles. La taille du maillage représenté est indiquée uniquement à titre d'illustration, et n'est pas à l'échelle
2.7	Distribution de la déformation plastique résiduelle dans le cas de l'acier 316L pour la taille de tache laser de 5 mm. (a) Solution de référence EF 3D. (b) Logarithme (\log_{10}) de l'erreur relative entre le modèle 1D et le modèle 3D
2.8	Comparaison de la déformation plastique axiale résiduelle entre les modèles 1D et 3D. Les résultats 3D sont pour $r = d/4$. Différents diamètres de taches laser sont représentés. (a) 12Cr, (b) 316L, (c) Ti-6Al-4V et (d) Al7175-T6
2.9	Distribution des contraintes résiduelles dans le cas de l'acier 316L pour la taille du spot de 5 mm. (a) Solution de référence EF 3D (σ_{22} en MPa) et (b) Logarithme (\log_{10}) de l'erreur relative entre le modèle 1D et le modèle 3D
2.10	Comparaison des contraintes résiduelles entre les modèles 1D et 3D. Les résultats 3D sont pris à $r = d/4$. Différents diamètres de taches laser sont représentés. Les figures insérées montrent des zooms pour $r \leq 1$ mm. (a) 12Cr, (b) 316L, (c) Ti-6Al-4V et (d)
~	$AI7075-T6. \qquad \qquad$
2.11	Comparaison entre le modèle EF 3D (pour un diamètre de tache laser de 5 mm) et le modèle 1D, avec des épaisseurs de 3 mm et 20 mm, pour l'acier 316L. (a) déformations plastiques résiduelles et (b) contraintes résiduelles
2.12	Comparaison des contraintes résiduelles entre les modèles EF 3D (pour un diamètre de tache laser de 5 mm) et 1D, avec les hypothèses d'éprouvette infiniment plane et semi-infinie, pour le matériau 316L

2.13	Comparaison des champs résiduels entre les modèles 1D et 3D pour une amplitude de pression de 5 GPa pour le matériau 316L. (a) Déformation plastique axiale et (b) Contraintes résiduelles	72
3.1	Procédé de grenaillage laser. (a) Représentation du procédé (d'après Scius-Bertrand et al. [171]). (b) Profil typique de la pression normalisée au centre de l'impact [153].	77
3.2	Représentation du spécimen laminé. La pression du plasma est appliquée vers la gauche sur le spécimen de longueur L et comprenant de nombreuses couches. La direction e_1 désigne la direction de la propagation des ondes 1D.	80
3.3	Instants de la propagation de l'onde de contrainte axiale σ_{11} pour les cas de test avec les plus grands contrastes entre les phases. (a) Propagation à $t = 110$ ns (b) Propagation à $t = 270$ ns (c) Propagation à $t = 405$ ns (d) Propagation à $t = 540$ ns	91
3.4	Propagation de l'onde de contrainte axiale σ_{11} pour les cas test avec les plus grands contrastes entre les phases, à $t = 110$ ns, zoom afin de mieux observer les précurseurs élastiques	92
3.5	Comparaison des profils de déformation plastique pour le cas hétérogène et le cas ho- mogène avec des propriétés élastiques $(\kappa^{(1)}, \mu^{(1)})$ et le cas homogène avec des propriétés élastiques $(\kappa^{(2)}, \mu^{(2)})$. (a) Représentation dans tout le domaine spatial. (b) Vue agrandie pour montrer la nature oscillatoire du profil dans l'échantillon stratifié	94
3.6	Distribution des profils de comportement et d'amplitude moyens post-traités calculés à partir de la solution de champ complet du stratifié dans le cas test 1	95
3.7	Influence de l'hétérogénéité des modules $\kappa^{(i)}$ (avec le coefficient μ constant) sur la dis- tribution de la déformation plastique (cas 1 à 4). (a) Déformations plastiques moyennes. (b) Amplitude des variations du champ de déformation plastique	95
3.8	Influence de l'hétérogénéité des modules $\mu^{(i)}$ (avec le coefficient coefficient κ constant) sur la distribution de la déformation plastique (cas 5 à 8). (a) Déformations plastiques moyennes. (b) Amplitude des variations du champ de déformation plastique	96
3.9	Influence de l'hétérogénéité de la limite élastique $\sigma_Y^{(i)}$ (avec les coefficients κ et μ constants) sur la distribution de la déformation plastique (cas 5 à 8). (a) Déformations plastiques moyennes. (b) Amplitude des variations du champ de déformation plastique.	96
3.10	Instants de la propagation des ondes de contrainte axiale obtenus avec le modèle en champ complet et le modèle MHE. (a) Cas test 4 à $t = 110$ ns, (b) Cas test 4 à $t = 540$ ns, (c) Cas test 8 à $t = 110$ ns, (d) Cas test 8 à $t = 540$ ns, (e) Cas test 12 à $t = 110$ ns, (f) Cas test 12 à $t = 540$ ns	98
3.11	Superposition du profil de déformation plastique en champ complet et de la déformation plastique locale obtenue à l'aide du MHE. (a) Cas test 1 et (b) cas test 5	100
3.12	Superposition du profil de déformation plastique en champ complet et de la déformation plastique locale obtenue à l'aide du MHE. (a) Cas test 4 et (b) Cas test 8	100
3.13	Superposition du profil de déformation plastique en champ complet et de la déformation plastique locale obtenue à l'aide du MHE. (a) Cas test 9 et (b) Cas test 12	101

3.14	Comparaison entre la déformation plastique moyenne du modèle basé sur MHE et la déformation plastique moyenne de la solution de référence en champ complet pour $d_{\rm ln} = 0.2$. (a) Cas test 1 et (b) Cas test 5	102
3.15	Comparaison entre la déformation plastique moyenne du modèle basé sur le MHE et la déformation plastique moyenne de la solution en champ complet pour $d_{\rm ln} = 0.4$. (a) cas test 4 et (b) Cas test 8	102
3.16	Comparaison entre la déformation plastique moyenne du modèle basé sur le MHE et la déformation plastique moyenne de la solution en champ complet pour $d_{\ln} = 0$. (a) Cas test 9 et (b) Cas test 12	103
3.17	Profils de déformation plastique pour le modèle en champ complet et le modèle MHE dans le cas de couches épaisses	106
4.1	Illustration d'une tesselation de Voronoi. Les points blancs correspondent aux germes des grains. Le code couleur sert à identifier les grains différents	112
4.2	Définition des angles d'Euler selon la convention de Bunge [37]. S : repère de l'échan- tillon, C : repère du cristal.	113
4.3	Variation des coefficients du tenseur des rigidités en fonction du premier angle d'Euler φ_1 . (a) Coefficients (hors coefficients de couplage) normalisés. (b) Coefficients de couplage	.115
4.4	Illustration du procédé de LSP pour la modélisation 2D	118
4.5	Variations des vitesses de propagation des ondes longitudinales, transversales et de cisaillement en fonction du premier angle d'Euler φ_1	121
4.6	Cission résolue obtenue sur le deuxième système de glissement avec le modèle visco- plastique. Ici, $\tau^{(2)} < 0$ en traction. (a) Orientation $\varphi_1 = 0$. (b) Orientation $\varphi_1 = \pi/8$.	126
4.7	Schéma du problème pour la détermination de contraintes résiduelles	127
4.8	Modélisation du chargement en pression issu de l'impact laser. La pression est norma- lisée. (a) Profil temporel. (b) Profil spatial	132
4.9	Déformation plastique cumulée globale γ (visuel agrandi) pour un impact unique sur un monocristal. Les lignes blanches en tirets correspondent aux directions de glissement du système de glissement 1, et les lignes blanches en tirets/points correspondent aux directions de glissement du système de glissement 2. (a) Orientation du cristal définie par $\varphi_1 = 0$. (b) Orientation du cristal définie par $\varphi_1 = \pi/6$	134
4.10	Distribution de la quantité $\gamma^{(2)}$ (visuel agrandi) pour un impact unique sur un monocris- tal avec $\varphi_1 = \pi/6$. Les lignes en tirets noirs correspondent aux directions de glissement du système de glissement 2.	135
4.11	Représentation théorique des lignes correspondant aux directions de glissement. (a) Orientation du cristal définie par $\varphi_1 = 0$. (b) Orientation du cristal définie par $\varphi_1 = \pi/6$.135
4.12	Cartographies du logarithme décimal de la vitesse de déformation plastique cumulée $\dot{\gamma}$ (s ⁻¹) à différents instants, pour le monocristal orienté avec $\varphi_1 = \pi/6$. (a) $t = 29.9$ ns. (b) $t = 104.5$ ns. (c) $t = 179.1$ ns	136

Rotations en degré de la maille cristalline (visuel agrandi) pour un impact unique sur un monocristal. (a) Orientation du cristal définie par $\varphi_1 = 0$. (b) Orientation du cristal définie par $\varphi_1 = \pi/6$	137
Contraintes résiduelles σ_{22} (MPa) pour un impact unique sur un monocristal (visuel agrandi). Les lignes noires en tirets correspondent aux directions de glissement du système de glissement 1, et les lignes noires en tirets/points correspondent aux directions de glissement du système de glissement 2. (a) Orientation du cristal définie par $\varphi_1 = 0$. (b) Orientation du cristal définie par $\varphi_1 = \pi/6$.	137
Profils spatiaux des contraintes résiduelles dans un monocristal en fonction de la pro- fondeur, pour une ligne correspondant à l'axe de l'impact laser $(y = 0)$, pour des orientations cristallines telles que $\varphi_1 = 0$ et $\varphi_1 = \pi/6$.	138
Distribution des orientations cristallines dans le cas d'un bicristal. Partie bleue : $\varphi_1 = 0$. Partie marron : $\varphi_1 = \pi/6$.	139
Déformation plastique cumulée globale γ (visuel agrandi) pour un impact unique sur un bicristal. La ligne en pointillé marque l'interface entre les deux cristaux	139
Contraintes résiduelles σ_{22} (MPa) pour un impact unique sur un bicristal (visuel agrandi)	.140
Distribution du premier angle d'Euler φ_1 (rad) utilisées pour les simulations. (a) Microstructure 1. (b) Microstructure 2	141
Distribution de la déformation plastique cumulée globale γ . Les lignes blanches représentent le masque de la microstructure. (a) Microstructure 1. (b) Microstructure 2	141
Différences entre les deux microstructures pour des profils en profondeur $(y = 0)$. (a) 1er angle d'Euler φ_1 . (b) Déformation plastique cumulée γ	142
Cartographies du logarithme décimal de la vitesse de déformation plastique cumulée $\dot{\gamma}$ (s ⁻¹) à différents instants dans la microstructure de la Figure 4.20(a). Les lignes noires représentent le masque de la microstructure. (a) $t = 43.7$ ns. (b) $t = 123.6$ ns. (c) $t = 180.0$ ns.	143
Distribution des contraintes résiduelles σ_{22} (MPa). Les lignes noires représentent le masque de la microstructure. (a) Microstructure 1. (b) Microstructure 2	144
Distribution des contraintes résiduelles σ_{22} (MPa) moyennées par grains. Les lignes noires représentent le masque de la microstructure. (a) Microstructure 1. (b) Micro- structure 2.	144
Distribution des contraintes résiduelles σ_{22} (MPa) moyennées par grains. (a) En surface $(x = 0)$. (b) En profondeur $(y = 0)$	145
Evolution de l'erreur relative sur la déformation plastique cumulée au centre de l'impact obtenue avec <i>i</i> simulations.	147
Moments statistiques du champ de déformation plastique cumulée obtenus sur 30 simu- lations. (a) Champ moyen. (b) Champ d'écart-type.	147
Champ moyen de la déformation plastique cumulée globale. (a) Valeurs du champ en surface $(x = 0)$. (b) Valeurs du champ en profondeur et au centre de l'impact $(y = 0)$.	148
Champ moyen de la rotation de la maille cristalline en surface $(x = 0)$	148
	Rotations en degré de la maille cristalline (visuel agrandi) pour un impact unique sur un monocristal. (a) Orientation du cristal définie par $\varphi_1 = \pi/6$

4.30	Mesures par microdiffraction des rayons-X de la rotation de maille cristalline dans le plan de la surface impactée [46]. Des chocs successifs sont réalisés sur un ligne, et les différentes lignes indiquées sur la figure correspondent à des lignes de mesures perpendiculaires à la ligne selon laquelle les chocs ont été effectués, espacées de 20 μ m	149
4.31	Champ moyen des contraintes résiduelles. (a) Valeurs du champ en surface $(x = 0)$. (b) Valeurs du champ en profondeur et au centre de l'impact $(y = 0)$	150
4.32	Champ moyen des contraintes résiduelles moyennées par grain. (a) Valeurs du champ en surface $(x = 0)$. (b) Valeurs du champ en profondeur et au centre de l'impact $(y = 0)$.150
4.33	Microstructures types utilisées pour le calcul des champs de déformation plastique cu- mulée. (a) Taille moyenne de grain de 40 μ m. (b) Taille moyenne de grain de 80 μ m. (c) Taille moyenne de grain de 160 μ m.	152
4.34	Distributions de la moyenne des déformations plastiques cumulées moyennées sur 30 simulations. (a) Valeurs en surface $(x = 0)$. (b) Valeurs en profondeur $(y = 0)$	153
4.35	Comparaison des profils de déformation plastique cumulée, en surface et en profondeur, entre une réalisation d'un type de microstructure, et le champ moyen calculé sur 30 réalisations. (a) Profil en surface, $d_{grain} = 40 \ \mu m$. (b) Profil en profondeur, $d_{grain} = 40 \ \mu m$. (c) Profil en surface, $d_{grain} = 80 \ \mu m$. (d) Profil en profondeur, $d_{grain} = 80 \ \mu m$. (e) Profil en surface, $d_{grain} = 160 \ \mu m$. (f) Profil en profondeur, $d_{grain} = 160 \ \mu m$	154
4.36	Evolution de l'erreur relative sur la moyenne de la déformation plastique cumulée au centre de l'impact obtenue avec <i>i</i> simulations	155
4.37	Microstructures types utilisées pour le calcul des vitesses en face arrière. (a) Taille moyenne de grain de 40 μ m. (b) Taille moyenne de grain de 80 μ m. (c) Taille moyenne de grain de 160 μ m.	156
4.38	Profils de vitesses en face arrière moyennes pour les différents types de microstructures. (a) Une réalisation unique pour chaque taille moyenne de grain différente. (b) Profils moyens réalisés sur 30 simulations pour les trois types de microstructures	156
4.39	Profils de vitesse en face arrière moyenne. (a) Pour une taille moyenne de grain de 40 μ m. (b) Pour une taille moyenne de grain de 80 μ m. (c) Pour une taille moyenne de grain de 160 μ m. (d) Zoom au niveau du précurseur pour la taille moyenne de grain de 160 μ m.	157
4.40	Evolution de l'erreur relative sur la vitesse maximale en face arrière obtenue avec i	107
1.10	simulations	158
A.1	Distribution spatiale de l'onde de contrainte normalisée à l'instant $t = 140$ ns pour différentes valeurs du nombre CFL. (a) Méthode de Lax-Friedrichs. (b) Méthode de Lax-Wendroff. (c) Méthode de Godunov. (d) Méthode de Godunov à haute résolution.	167
A.2	Diagramme $x - t$ dans le cas d'une propagation élastique dans un matériau hétérogène [18]	169
A.3	Comparaison des résultats entre la solution analytique de la propagation élastique dans un matériau hétérogène et différentes méthodes numériques à $t = 300$ ns. (a) Distribu- tion spatiale de la contrainte axiale. (b) Distribution spatiale de la vitesse axiale	170

A.4	Comparaison des résultats en contrainte entre la solution analytique de la propagation élastique dans un matériau hétérogène et différentes méthodes numériques à $t = 300$ ns. « Abaqus défaut » dénote la solution ABAQUS avec les paramètres de viscosité artificielle par défaut, tandis que « Abaqus ss visc » dénote la solution avec des paramètres de viscosité artificielle nuls	171
A.5	Diagramme $x - t$ dans le cas d'une propagation élasto-plastique dans un matériau homogène, avec une pression appliquée de 2 GPa	173
A.6	Comparaison des résultats entre la solution analytique de la propagation élasto-plastique dans un matériau homogène et différentes méthodes numériques à $t = 200$ ns pour une pression de 2 GPa. (a) Distribution spatiale de la contrainte axiale. (b) Distribution spatiale de la vitesse axiale	175
A.7	Comparaison des résultats en contrainte entre la solution analytique de la propagation élasto-plastique dans un matériau homogène et différentes méthodes numériques à $t = 200$ ns pour une pression de 2 GPa. « Abaqus défaut » dénote la solution ABAQUS avec les paramètres de viscosité artificielle par défaut, tandis que « Abaqus ss visc » dénote la solution avec des paramètres de viscosité artificielle nuls	176
A.8	Diagramme $x - t$ dans le cas d'une propagation dans un matériau homogène élasto- plastique, avec une pression appliquée de 5 GPa (voir également [18])	177
A.9	Comparaison des résultats entre la solution analytique de la propagation élasto-plastique dans un matériau homogène et différentes méthodes numériques à $t = 250$ ns pour une pression de 5 GPa. (a) Distribution spatiale de la contrainte axiale. (b) Distribution spatiale de la vitesse axiale	178
A.10	Comparaison des résultats en contraintes entre la solution analytique de la propagation élasto-plastique dans un matériau homogène et différentes méthodes numériques à $t =$ 250 ns pour une pression de 5 GPa. « Abaqus défaut » dénote la solution ABAQUS avec les paramètres de viscosité artificielle par défaut, tandis que « Abaqus ss visc » dénote la solution avec des paramètres de viscosité artificielle nuls.	179
A.11	Comparaison des méthodes de calcul de la propagation élasto-plastique à $t = 250$ ns. « advection plastique » dénote la solution obtenue en résolvant l'équation d'advection avec le module tangent, « retour radial » dénote la solution obtenue en appliquant une procédure de retour radial	180
C.1	Illustration du problème de l'inclusion thermo-élastique	190
C.2	Illustration du maillage au niveau de l'inclusion dans le logiciel ABAQUS	191
C.3	Cartographies des amplitudes de déplacement (en mm). (a) Solution EF. (b) Solution DF. (c) Logarithme décimal de l'erreur relative entre les solutions EF et DF	192
C.4	Distribution des composantes de déformation totale selon les solutions EF ou DF. (a) Distribution sur l'axe y . (b) Distribution sur l'axe x	193
C.5	Distribution des composantes de contraintes selon les solutions EF ou DF. (a) Distribution sur l'axe y . (b) Distribution sur l'axe x .	193

Introduction générale

Enjeux industriels

La conception et le dimensionnement des structures nécessitent de nombreuses analyses permettant de caractériser et prévoir leurs différents comportements (rupture, vibrations, flambage, etc.). Une discipline essentielle est celle de la prévision de la tenue d'une pièce ou d'un système sur une longue durée lorsque ce dernier est soumis à des chargements se répétant de manière cyclique. En effet ce type de chargement peut mener à une rupture brutale et imprévisible des pièces, car il favorise la croissance et la propagation de fissures et de défauts présents au préalable, à cause par exemple des procédés de fabrication ou d'assemblage. Nous pouvons citer par exemple les catastrophes ferroviaires de Meudon et aériennes du Comet De Havilland, qui ont rendu la connaissance du comportement en fatigue tristement impérative (voir Figure 1).



FIGURE 1 – Illustration de rupture par fissuration dues à la fatigue. (a) Illustration de la fissuration d'un essieu de wagon de train [78]. (b) Photo du fuselage intérieur d'un Comet I après un test de fatigue sur la structure [12]

L'amélioration de la résistance à la fatigue a pour objectif d'éviter des accidents et des ruptures prématurées, mais également d'optimiser l'usage de composants en augmentant leur durée de vie, ou durée d'utilisation. A partir de l'observation que les fissures s'initient en surface, des traitements ont été développés afin de contrecarrer leur potentiel destructeur. Le grenaillage fait partie de ces traitements, et repose sur une déformation plastique de la surface menant à des contraintes résiduelles de compression [180]. Des sphères métalliques sont projetées avec une vitesse suffisante afin de déformer plastiquement la surface du matériau. Une amélioration de ce procédé peut se trouver dans le grenaillage laser, ou Laser Shock Peening (LSP) [60], où les sphères métalliques sont remplacées par un laser à haute énergie. L'impact du laser à la surface du matériau ionise la matière, créant un plasma pendant un dizaine de nanosecondes. L'expansion de ce plasma contre la surface du matériau permet de lui transmettre de l'énergie sous la forme d'une onde de contrainte, dont l'amplitude peut être suffisante pour plastifier le matériau, et y introduire des contraintes résiduelles de compression. Cependant, la compréhension de ce procédé et son application dans un contexte industriel nécessitent des modèles numériques précis.

Cette thèse a été financée par le projet FORGE LASER (ANR-18-CE08-0026), regroupant plusieurs partenaires industriels (Airbus, Thales, Imagine Optics et Rescoll) ainsi que plusieurs laboratoires de recherche (PIMM, I2M et CEA). Outre l'aspect grenaillage laser, ce projet de recherche concerne également des aspects fatigue des matériaux. En plus de la thèse dont ce manuscrit est issu, deux autres thèses ont été financées par ce projet, chacune concernant un aspect différent de la maîtrise du procédé de grenaillage laser. La thèse d'Alexandre Rondepierre [162] s'est concentrée sur l'étude et la maîtrise de l'interaction laser-matière ayant lieu au moment de l'impact, et ce pour des taches de petites tailles (diamètre de moins d'un millimètre). La thèse de Corentin le Bras [29] a porté sur l'étude de la possibilité d'utiliser un matériau polymère pour le confinement du plasma, là où de l'eau est traditionnellement utilisée. Ces deux thèses étant de nature principalement expérimentale, ce manuscrit couvrira des aspects orientés modélisation et simulation.

Contexte scientifique

La modélisation du grenaillage laser commence avec les travaux de Ballard [18], qui propose une modélisation théorique et numérique, lui permettant d'étudier aussi bien la propagation de l'onde de contrainte générée par le choc laser que les champs de déformations plastiques et de contraintes résiduelles. Ces travaux sont repris par Braisted [28], qui modélise le grenaillage laser à l'aide d'un code de calcul commercial par Éléments Finis. De par les pressions générées (~ GPa) et des temps d'impulsion laser (~ 10 ns), la vitesse de déformation peut atteindre 10^6 s^{-1} , ce qui en fait un des procédés et phénomènes mécaniques les plus rapides (avec par exemple les impacts balistiques). Aujourd'hui, le grande majorité des travaux sur le choc laser utilisent le modèle de Johnson-Cook [93] pour modéliser le comportement isotrope du matériau supposé homogène [153]. Grâce à ce modèle, de nombreuses études ont pu être réalisées, allant de l'influence de la taille de la tache laser sur la propagation de l'onde de contrainte, jusqu'à la modélisation des contraintes résiduelles générées par des tirs successifs présentant un motif de recouvrement, en passant par l'influence de la pression sur les champs mécaniques générés [34, 86, 193].

Verrous scientifiques

La modélisation et les simulations du grenaillage laser ont aujourd'hui un bon niveau de précision, permettant la maîtrise et l'application du procédé dans un contexte industriel. De manière générale, certaines zones d'ombre persistent :

1. La simulation du procédé est maîtrisée à l'échelle macroscopique (échelle de l'échantillon ou de

la structure). Ce n'est cependant pas le cas à l'échelle de la microstructure hétérogène dont sont constitués les matériaux (ici métalliques) traités par choc laser. Une étude du procédé à cette échelle permettrait de mieux comprendre les phénomènes de propagation d'onde, mais surtout de comprendre le développement de la plasticité induite à l'échelle des grains [189]. Un résultat complet et satisfaisant serait de faire le lien entre l'échelle macroscopique et cette échelle mésoscopique, en validant les résultats de simulation ou d'expériences.

- 2. De manière générale, la validation de modèles numériques par des résultats expérimentaux est essentielle, et le grenaillage laser ne déroge pas à la règle. Des comparaisons de contraintes résiduelles entre expériences et simulations existent déjà, et permettent des conclusions pertinentes. Cependant, une différence de nature existe entre ces approches. Là où la simulation permet d'aboutir à des valeurs locales de contraintes résiduelles, une telle résolution est impossible avec les moyens expérimentaux actuels. Certaines particularités encore peu observées des contraintes résiduelles induites par choc laser pourraient donc être quantifiées expérimentalement avec plus de détails [133].
- 3. A cause des vitesses de déformations typiques du choc laser très difficilement reproductibles lors d'essais mécaniques, le comportement des matériaux à ces vitesses reste peu connu. Notamment, le modèle de Jonson-Cook aujourd'hui utilisé pour les simulations de grenaillage laser a été développé et testé pour des vitesses de déformations nettement inférieures à celles mises en jeu pour le grenaillage laser [93]. Son comportement est donc extrapolé pour l'application du choc laser, introduisant potentiellement des erreurs.

Tous les verrous identifiés ne seront pas abordés dans ce manuscrit, qui s'efforcera d'apporter des éléments de réponse sur les questions de modélisation du choc laser. En particulier, la question principale de ce travail est de déterminer l'influence d'une microstructure hétérogène sur les champs mécaniques générés lors d'un impact laser. Les aspects mesures expérimentales et comportement à très hautes vitesses de déformations ne seront donc pas traités.

Plan du manuscrit

Le manuscrit est organisé de la façon suivante :

- Le Chapitre 1 présente en détails l'état de l'art. Pour cela, l'accent est mis sur les techniques et modèles nécessaires afin de réaliser des simulations de choc laser.
- Afin de servir de base au reste du manuscrit, le **Chapitre 2** présente un modèle de propagation 1D, dont le fondement et l'application sont étendus ensuite. Il est montré qu'un tel modèle est capable de fournir une estimation raisonnable des champs mécaniques résultant de l'impact.
- La notion d'hétérogénéité de la microstructure est introduite dans le **Chapitre 3**, dans lequel nous étendons le modèle développé dans le chapitre 2 au cas d'un laminé 1D. Cette modélisation permet de dégager des tendances principales de l'influence d'une microstructure hétérogène sur la propagation d'une onde de contrainte et sur les champs de déformations plastiques. Une démarche d'homogénéisation élasto-plastique est menée pour mieux quantifier ces tendances, et optimiser les calculs dans le cas de microstructures fines devant les dimensions caractéristiques de l'impact.
- Le **Chapitre 4** poursuit l'étude de l'influence de l'hétérogénéité microstructurale dans la modélisation du grenaillage laser en considérant cette fois-ci un matériau 2D polycristallin incorporant des aspects de plasticité cristalline. Ces simulations montrent l'influence de la microstructure

sur les champs métalliques, et une approche statistique permet d'étudier les fluctuations statistiques des champs mécaniques liés aux microstructures stochastiques, ainsi que l'influence de la taille moyenne des grains de la microstructure.

• Le manuscrit se termine avec une conclusion générale et des perspectives à ce travail.

Chapitre 1

Contexte et état de l'art

Contenu

1.1	Contexte
1.2	Traitement de surface par grenaillage laser
1.3	Comportement à hautes vitesses de déformations
	1.3.1 Équations d'état
	1.3.2 Modèles de plasticité
1.4	Comportement mécanique d'un polycristal et d'une microstructure
	1.4.1Comportement élastique d'un grain19
	1.4.2 Modélisation du comportement plastique d'un grain
	1.4.3 Modélisation géométrique d'un polycristal
1.5	Mesures de vitesse en face arrière par VISAR
1.6	Quelques résultats théoriques sur le choc laser
1.7	Simulations numériques du grenaillage laser
	1.7.1 Modélisation par Elements Finis du choc laser
	1.7.2 Etudes numériques de l'influence des paramètres du choc laser
	1.7.3 Prise en compte de la nature cristalline du matériau
1.8	Méthodes numériques pour la propagation d'ondes de contraintes 42
	1.8.1 Schéma numérique intégré au code commercial ABAQUS/Explicit 42
	1.8.2 Méthodes basées sur les différences finies 43
1.9	Conclusion du chapitre et objectifs de la thèse

1.1. CONTEXTE

Le but de ce chapitre est de fournir un aperçu de l'état de l'art des connaissances et pratiques concernant la simulation numérique de grenaillage laser et de sujets associés. Plusieurs aspects sont concernés : le procédé de grenaillage laser en lui-même, les « outils » nécessaires à la réalisation de simulations (les lois de comportement à hautes vitesses de déformations, les méthodes numériques pour des simulations en dynamique explicite), et enfin les simulations de grenaillage laser en ellesmême. Par anticipation du contenu de ce manuscrit, ce chapitre abordera également des éléments de modélisation de l'élasticité et plasticité cristalline. En effet, outre le fait de faire un état de l'art des connaissances relatives à la simulation de grenaillage laser, ce chapitre permettra de situer le travail présenté dans ce manuscrit par rapport à la littérature. Il apparaîtra notamment que la microstructure hétérogène des cibles métalliques du grenaillage laser est souvent négligée dans la littérature. Cet aspect sera donc le thème principal du travail présenté.

La structure de ce chapitre sera la suivante : le procédé de grenaillage laser sera d'abord présenté. Les performances d'une simulation numérique reposent en grande partie sur la loi de comportement choisie pour le matériau. Une section sera donc dédiée aux lois de comportement macroscopiques à hautes vitesses de déformation. Un des buts du travail présenté dans ce manuscrit sera de réaliser des simulations de choc laser avec une modélisation de plasticité cristalline. Des modèles de comportements cristallins seront donc ensuite présentés. Ensuite, afin d'augmenter la pertinence des simulations, il est préférable d'identifier les lois de comportement sur des chargement représentatifs du procédé simulé. La méthodologie d'identification sur signaux de vitesses en face arrière sera donc abordées. A la suite de cela, les simulations de grenaillage laser à proprement parler seront présentées, donc les descriptions pourront s'appuyer sur les aspects vu précédemment dans ce chapitre. Enfin, les aspects méthodes numériques sous-jacents aux simulations de phénomènes dynamiques seront détaillés.

1.1 Contexte

Pour de nombreuses applications industrielles, la problématique de la durée de vie des composants mécaniques est primordiale. S'assurer qu'une pièce d'un mécanisme puisse rester en service le plus longtemps possible sans compromettre l'intégrité du système permet une économie de ressources sur tout le cycle de vie du système en question. Cependant, l'utilisation d'un composant sur une très longue durée implique de considérer son comportement en fatigue. Cette discipline vise à étudier la durée de vie d'un système mécanique (composant mécanique, structure, etc.) soumis à un chargement cyclique répété un grand nombre de fois. En particulier, une pièce d'un système mécanique peut présenter des microfissures à sa surface, qui peuvent être aggravées par un chargement cyclique, jusqu'à se propager subitement, causant la rupture du système. La rugosité d'une surface, si elle est élevée, peut mener à des concentrations de contraintes au niveau d'aspérités géométriques, pouvant également provoquer une initiation de fissures. Il est bien souvent impossible d'éviter la présence de ces fissures, auquel cas il est indispensable de pouvoir en contrôler le comportement, ou tout du moins limiter leur influence sur la durée de vie du système en question.

Une solution permettant de remédier à ces risques d'endommagement dus à la fatigue est de traiter le matériau afin de l'écrouir et d'y introduire des contraintes résiduelles de compression. Ces contraintes résiduelles de compression, que l'on peut définir comme un état de contrainte présent dans le matériau en l'absence de tout chargement extérieur, ont pour effet d'augmenter le nombre de cycles de chargement pour une amplitude de contrainte donnée qu'un matériau peut subir avant de rompre,
ou d'augmenter l'amplitude de contrainte à appliquer sur un matériau le faisant rompre au bout d'un nombre de cycles donné, tel qu'illustré sur la Figure 1.1.



FIGURE 1.1 – Courbes de Wöhler pour l'aluminium AL7075-T7351 non traité (untreated), traité par grenaillage (shot-peened), et traité par grenaillage laser (LSP, Laser Shock Peening) [154].

Des procédés ont donc été mis en place afin d'introduire délibérément des contraintes résiduelles de compression en surface de composants mécaniques, car c'est essentiellement à partir de la surface que des défauts ou des fissures se propagent jusqu'à causer la rupture. Parmi les procédés capables d'un tel résultat, on trouve le grenaillage, qui vise à introduire les contraintes résiduelles de compression par impact rapide entre la surface à traiter et un projectile. Dans le cas du grenaillage conventionnel, ou Shot Peening (SP), des billes métalliques de petites tailles sont projetées sur la surface à traiter [73]. Nous pouvons également mentionner le procédé SMAT (Surface Mechanical Attrition Treatment), semblable au grenaillage conventionnel, mais qui permet un raffinement de la microstructure en surface tout en gardant une faible rugosité, grâce à des tirs de plus faibles vitesses et des billes de plus gros diamètres qu'avec le grenaillage conventionnel [197]. Pour ce procédé, la pièce à traiter est généralement placée dans une enceinte fermée. Des billes métalliques sont projetées à des vitesses ultrasoniques dans toutes les directions dans l'enceinte par une paroi vibrante (~ kHz) [207]. Avec le grenaillage conventionnel, les billes sont projetées depuis une direction préférentielle. La modélisation des deux méthodes peut incorporer une modélisation particulière du contact entre les billes et la cibles (Kubler et al. [107], qui modélisent le rayon d'impact à l'aide de la théorie de Hertz) et une modélisation des statistiques d'impact dans le cas du SMAT, les billes étant projetées dans toutes les directions dans la boite [16]. Nous pouvons également mentionner les travaux de Breumier et al. [32] (voir aussi [31]), qui concernent champ de contraintes résiduelles induit sur un monocristal de cuivre suivant plusieurs orientations. Il en conclut que l'anisotropie cristalline des grains peut mener à des contraintes résiduelles de tractions en surface de l'échantillon, en particulier les orientations proches de la direction [001]. Une alternative plus récente est d'utiliser un laser à haute énergie. Il s'agit dans ce cas du grenaillage laser, ou Laser Shock Peening (LSP). C'est de ce procédé en particulier, et de sa modélisation, dont il sera question dans ce manuscrit. Le grenaillage laser a été est utilisé dans les domaines de l'automobile, l'aéronautique et l'énergie [50]

1.2 Traitement de surface par grenaillage laser

Le principe du grenaillage laser repose sur la création d'un plasma créé par l'ionisation de la couche surfacique de la cible lors de l'interaction laser-matière. Lors de son expansion, le plasma comprime la matière, dans laquelle se propage alors une onde de contrainte. Si l'amplitude de cette dernière est suffisamment élevée, alors le matériau est déformé plastiquement. Pour cela, les lasers utilisés ont généralement une durée d'impulsion de quelques dizaines de nanosecondes et une énergie d'une dizaine à une centaine de Joules [60]. Les diamètres des taches lasers, de l'ordre de quelques millimètres, permettent alors d'aboutir à une puissance surfacique de quelques GW/cm^2 . Le principe du grenaillage laser est illustré par la Figure 1.2.



FIGURE 1.2 – Illustration du procédé de grenaillage las [87].

Afin d'optimiser le procédé, et plus précisément d'augmenter la quantité d'énergie transférée du plasma au matériau, l'impact peut se faire en régime confiné. Cela revient à déposer un milieu transparent au laser sur la surface de l'échantillon, dans le but de confiner l'expansion du plasma [64, 69]. Dans ces conditions, la pression générée par le plasma P (en GPa) peut être calculée grâce aux travaux de Fabbro et al. [64] :

$$P = 0.01 \sqrt{\frac{\alpha}{2\alpha + 3}} \sqrt{Z} \sqrt{I_0}, \qquad (1.1)$$

où α est un nombre sans dimension représentant la fraction d'énergie interne du plasma, Z est l'impédance équivalente (en g.cm⁻².s⁻¹) du plasma et du milieu à son interface (telle que $1/Z = 2(1/Z_1 + 1/Z_2)$, les indices 1 et 2 représentant les milieux à l'interface) et I_0 est la densité surfacique d'énergie du laser (en GW.cm⁻²). Le milieu de confinement généralement utilisé est l'eau, mais des travaux récents [114, 115] portent sur la possibilité d'utiliser des milieux de confinements solides, pour des structures où l'utilisation de l'eau comme confinement est difficile, ou pour des surfaces à traiter proches de composants électroniques. Le Bras et al. [114] démontrent qu'un polymère transparent peut être utilisé comme milieu de confinement. Parallèlement, la modélisation du chargement en pression transmis dans l'échantillon est affinée avec les travaux étudiant le plasma généré par l'interaction laser-matière [163, 164, 171].

Cependant, l'usage d'un milieu de confinement peut faire apparaître un phénomène de claquage [114]. Le claquage correspond à l'apparition d'une interaction laser-matière à l'interface entre l'air et le milieu de confinement, créant un milieu non-transparent sur le passage du laser, ce qui a pour conséquence de diminuer la pression transmise au matériau. Dans sa thèse [162], A. Rondepierre montre cependant qu'une configuration avec une cuve d'eau au lieu d'un film d'eau permet de contourner la perte d'énergie liée au claquage, comme illustré sur la Figure 1.3.



FIGURE 1.3 – Evolution de la pression du plasma en fonction de l'intensité du laser [162]. La pression atteint un palier avec le film d'eau (points verts), contrairement à la configuration avec la cuve d'eau (points noirs et rouges).

Suivant les traitements, il est également possible de recouvrir le matériau d'un revêtement protecteur permettant de protéger la cible des effets thermiques dus à l'impact. L'influence d'un revêtement protecteur et donc des effets thermiques sur les contraintes résiduelles est illustrée dans la Figure 1.4.



FIGURE 1.4 – Influence des effets thermiques sur les contraintes résiduelles générées par grenaillage laser [165].

Les résultats de la Figure 1.4 montrent que l'absence de revêtement protecteur peut mener à des contraintes résiduelles de traction en surface (voir également [77]). Ces effets thermiques diminuent alors l'efficacité du traitement par grenaillage laser, voire favorisent la propagation de fissures. En effet, les contraintes résiduelles de compression peuvent retarder la propagation de fissures, alors que des contraintes résiduelles de traction auront l'effet inverse.

Le procédé du grenaillage laser dépend d'un grand nombre de paramètres : taille de la tache laser, forme de la tache laser, durée d'impulsion, nombre d'impacts, taux de recouvrement, motif de recouvrement, etc. Les conditions de fonctionnement préférées pour l'application du procédé sur des structures industrielles sont celles permettant d'obtenir des contraintes résiduelles fortes sur une grande surface. Il s'agit alors de traitement avec plusieurs tirs, avec recouvrement. Le recouvrement désigne le fait qu'un point à la surface du matériau peut être situé à l'intérieur de la tache laser pour des tirs consécutifs. Le taux de recouvrement est défini tel que [88] :

taux de recouvrement =
$$\frac{\Delta}{2r}$$
, (1.2)

où Δ est la distance sur le rayon en commun entre deux taches successives, et r le rayon d'une tache. Ces grandeurs sont illustrées dans la Figure 1.5. Différentes stratégies de balayage du laser sont proposées dans la littérature [3].



FIGURE 1.5 – Illustration du processus de recouvrement en LSP. (a) Illustration de la définition du taux de recouvrement. (b) Illustration d'un motif de recouvrement en zigzag.

En plus d'une amélioration de la durée de vie supérieure avec le LSP qu'avec le grenaillage conventionnel comme illustré dans la Figure 1.1, le grenaillage laser permet l'introduction de contraintes résiduelles de compression sur une plus grande épaisseur, comme illustré dans la Figure 1.6.



FIGURE 1.6 – Comparaison de la profondeur affectée par les contraintes résiduelles de compression entre le grenaillage conventionnel et le grenaillage laser [60] sur un Inconel 718.

En écho avec la Figure 1.1, Ge and Xiang [74] font le lien entre les contraintes résiduelles de compression introduites par grenaillage laser et l'évolution de la taille d'une fissure dans une éprouvette. Leurs résultats sont illustrés dans la Figure 1.7. Les auteurs montrent que dans le cas d'une éprouvette traitée par grenaillage laser, un plus grand nombre de cycles est nécessaire pour faire atteindre une taille donnée à une fissure par rapport à une éprouvette non traitée. Le taille de la fissure peut même rester constante sur plusieurs dizaines de millier de cycles.



FIGURE 1.7 – Evolution de la longueur d'une fissure en fonction du nombre de cycle de sollicitation entre une éprouvette non traitée et traitée par grenaillage laser [74] sur du Magnésium AZ31B.

Le grenaillage laser présente donc des avantages vis à vis du grenaillage conventionnel. Les hauts niveaux de pressions atteints garantissent une amélioration du comportement en fatigue [51, 132, 154]. Cependant, Cellard et al. [43] notent l'apparition de contraintes résiduelles de traction sur des échantillons fins dès le premier impact sur l'une de ses faces dues à l'équilibrage des contraintes résiduelles, et mettent en garde sur l'utilisation du LSP sur des échantillons fins.

La maîtrise du procédé LSP passe également par la capacité à reproduire et à prédire ces résultats

à l'aide de simulations numériques. Là où des campagnes d'essais visant à évaluer l'influence des paramètres du procédé pourraient être longues et coûteuses, la simulation se présente comme un appui dans l'étude du grenaillage laser. Afin d'être réalisées, les simulations de choc laser nécessitent plusieurs « outils » différents : une loi de comportement du matériau et une méthode numérique permettant de simuler le problème. Afin de pouvoir aborder le sujet des simulations, ces aspects précédents doivent être expliqués au préalable. Comme nous le verrons par la suite, la pierre angulaire des simulations de grenaillage laser est la loi de comportement utilisée pour modéliser la réponse du matériau. Cette dernière doit être adaptée à la sollicitation mécanique, qui dans le cas du choc laser, présente la particularité d'introduire de très grandes vitesses de déformation dans le matériau. Nous allons donc commencer par détailler différentes lois de comportement à hautes vitesses de déformations.

1.3 Comportement à hautes vitesses de déformations

En raison des vitesses de déformation lors du grenaillage laser, de l'ordre de 10^6 s^{-1} [95], des modèles de comportement pour des chargements statiques ne sont plus adaptés, et il convient de faire appel à des modèles prenant en compte une dépendance du comportement à la vitesse de déformation. Ces derniers peuvent concerner soit le comportement élastique du matériau, auquel cas on parle d'équation d'état, ou le comportement plastique, auquel cas on parle de loi de comportement.

1.3.1 Équations d'état

Lorsque le chargement auquel est soumis un matériau implique de fortes et rapides élévations de pression, le comportement du matériau se rapproche de l'hydrodynamique, donc d'un fluide. Le cadre thermodynamique servant à décrire sa réponse doit alors être adapté. Lors de la propagation d'une onde de choc hydrodynamique, il convient de différencier la vitesse du choc U_s et la vitesse des points matériels U_p . Dans la plupart des matériaux, ces deux vitesses sont reliées par une relation linéaire de la forme suivante [125] :

$$U_s = C_0 + SU_p,\tag{1.3}$$

où C_0 est appelé vitesse du son (analogue à la vitesse de propagation d'une onde élastique de contrainte de traction/compression), et où S est un coefficient dépendant du matériau. La propagation du choc doit respecter les équations de conservation de masse, moment et énergie :

 $\begin{cases} \rho_0 U_s = \rho \left(U_s - U_p \right) & \text{conservation de la masse} \\ P - P_0 = \rho_0 U_s U_p & \text{conservation du moment} \\ P U_p = \frac{1}{2} \rho_0 U_s U_p^2 + \rho_0 U_s \left(E_m - E_0 \right) & \text{conservation de l'énergie,} \end{cases}$ (1.4)

avec P, E_m et ρ la pression, l'énergie interne et la masse volumique respectivement, et P_0 , E_0 et ρ_0 les grandeurs correspondantes à un état de référence. Lors d'un choc, le comportement du matériau se place sur la courbe d'Hugoniot définie dans le diagramme (P, V) illustré sur la Figure 1.8.



FIGURE 1.8 – Courbe d'Hugoniot, adapté de [178]. Le point (V_f, P_f) correspond à l'état final, et le point (V_H, P_H) correspond à limite d'Hugoniot à partir de laquelle le comportement du matériau devient non linéaire.

La partie non-linéaire de la courbe d'Hugoniot de la Figure 1.8 peut être décrite par une équation d'état. La description couramment utilisée en choc laser est celle de Mie-Grüneisen [44, 179], dont l'équation, dans le cadre d'un matériau isotrope, permet de faire le lien entre l'énergie interne du matériau et l'évolution de la pression :

$$P - P_H = \Gamma_0 \rho_0 \left(E_m - E_H \right). \tag{1.5}$$

L'Equation (1.5), où P_H et E_H sont la pression et l'énergie interne au niveau de la limite d'Hugoniot, avec Γ_0 une constante matériau, peut être développée afin de correspondre à la forme utilisée dans les codes de calcul. A l'aide de l'équation de conservation de la masse, il est possible d'écrire

$$U_p = \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right) U_s = \eta U_s. \tag{1.6}$$

L'Equation (1.6) combinée à l'Equation (1.3) donne

$$U_s = \frac{C_0}{1 - \eta S}.$$
 (1.7)

En supposant $P_0 = 0$ et $E_0 = 0$ dans les équations de conservation du moment et de l'énergie, la pression et l'énergie interne au niveau de la limite d'Hugoniot peuvent être exprimées par

$$P_{H} = \frac{\rho_{0}C_{0}^{2}\eta}{(1-\eta S)^{2}} \quad \text{et} \quad E_{H} = \frac{P_{H}\eta}{2\rho_{0}}.$$
(1.8)

En introduisant ces grandeurs dans l'équation d'état de Mie-Grüneisen, nous obtenons :

$$P = \frac{\rho_0 C_0^2 \eta}{(1 - \eta S)^2} \left(1 - \frac{\Gamma_0 \eta}{2} \right) + \Gamma_0 \rho_0 E_m, \tag{1.9}$$

L'équation de Mie-Grüneison est utilisée sous cette forme dans les codes de calculs [105, 153, 184]. Selon Ballard [18], un tel modèle de comportement est nécessaire lorsque la pression appliquée lors d'un chargement dynamique P est telle que $P > 0.1\kappa$, où κ est le module de compressibilité du matériau (voir Figure 1.16).

1.3.2 Modèles de plasticité

Les modèles de plasticité font ici référence à des modèles décrivant l'évolution plastique d'un matériau. La plasticité fait appel à la notion de surface seuil f définissant le domaine élastique, par exemple telle que $f(\sigma, X, R, T) = 0$, où σ est le tenseur des contraintes, X est un « backstress », R une fonction d'écrouissage isotrope décrivant l'évolution de la limite élastique du matériau et T la température. Les fonctions X et R dépendent usuellement du tenseur des déformations plastiques ε_p , et de sa dérivée temporelle lorsque l'influence de la vitesse de déformation plastique est considérée. Dans le cas du choc laser, le « backstress » X est habituellement négligée, et la loi de comportement n'inclut alors seulement que l'écrouissage isotrope R. Nous allons présenter des exemples de modèles d'écrouissage utilisés pour des applications impliquant des ondes de choc.

Modèle de Johnson-Cook Le modèle de comportement à haute vitesse de déformation le plus utilisé pour les simulations de choc laser est celui de Johnson-Cook [93] :

$$R = (A + Bp^n) \left(1 + C \ln \left(\frac{\dot{p}}{\dot{\varepsilon}_0} \right) \right) \left(1 - \left(\frac{T - T_0}{T_m - T_0} \right)^m \right), \tag{1.10}$$

avec A la limite élastique du matériau, B et n des paramètres d'écrouissage, C un paramètre de sensibilité à la vitesse de déformation, $\dot{\varepsilon}_0$ la vitesse de déformation de référence, T la température du matériau, T_0 la température de référence, T_m la température de fusion du matériau, m un exposant, et p la déformation plastique cumulée, définie par

$$p = \int_0^t \dot{p}(\tau) d\tau \quad \text{où} \quad \dot{p} = \sqrt{\frac{2}{3} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p}, \tag{1.11}$$

où ε_p désigne le tenseur des déformations plastiques. L'opérateur « : » correspond au produit doublement contracté, défini de la manière suivante pour a et b deux tenseurs du second ordre, en utilisant la convention d'Einstein pour les indices répétés :

$$\boldsymbol{a}: \boldsymbol{b} = a_{ij}b_{ij}.\tag{1.12}$$

Le modèle de Johnson-Cook se décompose donc comme un produit de trois facteurs, chacun modélisant un aspect différent de la loi de comportement (écrouissage isotrope, sensibilité à la vitesse de déformation et sensibilité à la température). Il est important de noter qu'il s'agit d'un modèle phénoménologique. Il est également important de préciser que le modèle de Johnson-Cook a été développé pour modéliser le comportement de matériaux soumis à des vitesses de déformation ne dépassant pas 10^3 s^{-1} , bien en deçà des vitesses de déformations impliquées dans le grenaillage laser. Des déclinaisons de ce modèle existent afin de s'adapter à des comportements et matériaux particuliers [54, 98, 101, 166], lorsque le modèle de Johnson-Cook dans sa formulation classique ne permettait pas de reproduire fidèlement les résultats expérimentaux. Khan and Liang [101] présentent notamment une incapacité des modèles de Johnson-Cook et de Zerilli-Armstrong (présenté dans le paragraphe suivant) à modéliser le comportement du Tantale pour des vitesses de déformations atteignant 10^{-1} s^{-1} . Par ailleurs, Rule and Jones [166] indiquent que l'augmentation de la contrainte d'écoulement prévue par le modèle de Johnson-Cook est trop faible par rapport aux observations expérimentales pour des matériaux ductiles soumis à des vitesses de déformation de plus de 10^3 s^{-1} .

Modèle de Zerilli-Armstrong Inspirés par les travaux de Johnson-Cook, Zerilli et Armstrong [199] ont à leur tour développé un modèle permettant de modéliser le comportement de métaux soumis à de grandes vitesses de déformations, afin de reproduire des résultats obtenus lors d'essais d'impacts de Taylor. A la différence du modèle de Johnson-Cook, celui de Zerilli-Armstrong incorpore des fondements physiques traduisant le fait que le comportement de matériau à maille FCC est plus sensible à la déformation que ceux à maille BCC. Il en résulte deux expressions de la contrainte d'écoulement plastique, selon que le matériau soit à maille BCC ou FCC :

$$\begin{cases} R = \Delta \sigma'_G + C_2 \sqrt{\varepsilon_{eq}} \times \exp\left(-C_3 T + C_4 T \ln\left(\dot{\varepsilon}_{eq}\right)\right) + \frac{k}{\sqrt{l}} \quad \text{pour un matériau BCC} \\ R = \Delta \sigma'_G + C_1 \sqrt{\varepsilon_{eq}} \times \exp\left(-C_3 T + C_4 T \ln\left(\dot{\varepsilon}_{eq}\right)\right) + C_5 \varepsilon_{eq}^n + \frac{k}{\sqrt{l}} \quad \text{pour un matériau FCC}, \end{cases}$$
(1.13)

où C_1 , C_2 , C_3 , C_4 et C_5 sont des constantes à déterminer, k est un coefficient appelé « intensité de contrainte microstructurale », l est le diamètre moyen d'un grain, tandis que T représente la température, ε_{eq} la déformation équivalente (sans précision s'il s'agit de la déformation équivalente totale ou plastique) et $\dot{\varepsilon}$ la vitesse de déformation. Amarchinta et al. [8] se sont intéressés à l'utilisation de différents modèles de comportement dans la simulation du choc laser. Leurs résultats sont illustrés dans la Figure 1.9.



FIGURE 1.9 – Comparaison entre expériences et simulations des contraintes résiduelles en profondeur obtenues par LSP pour différentes pressions et différentes lois de comportement pour le Ti-6Al-4V. (a) Comportement Elastique Parfaitement Plastique. (b) Comportement Zerilli-Armstrong. (c) Comportement Johnson-Cook.

Les auteurs concluent des résultats de la Figure 1.9 que le modèle de Johnson-Cook est le plus adapté pour le comportement de leur matériau. Une conclusion similaire est obtenue dans Amarchinta et al. [7] (pour le Ti-6Al-4V et l'Inconel 718), où les auteurs soulignent également la performance du modèle Khan-Huang-Liang [103], dérivé de celui de Johnson-Cook. D'autres modèles de comportement existent pour les très hautes vitesses de déformation, comme le modèle de Steinberg, ou de Preston-Tonks-Wallance [67, 158, 169, 181, 182], qui ne seront pas détaillés dans ce manuscrit. Ces modèles sont adaptés pour les grandes déformations, telles que les impacts balistiques ou explosion. L'influence de la température y est primordiale.

Les lois de comportement dont il a été question juste ici correspondent à des modèles macroscopiques, dans lesquels les matériaux sont considérés comme isotropes et homogènes. Des modèles de comportement existent pour les différentes échelles de la matière. Les matériaux traités par choc laser sont habituellement des alliages métalliques, constitués d'une microstructure faite d'agrégats de grains, aux comportements différentes d'un modèle macroscopique, que certains travaux [188, 189] sur la simulation du LSP tentent de modéliser. Afin de pouvoir discuter de ces travaux ultérieurement, nous allons donc maintenant présenter certains aspects de la modélisation du comportement des cristaux et polycristaux.

1.4 Comportement mécanique d'un polycristal et d'une microstructure

Les lois de comportement de la Section 1.3.2 ne sont valables que pour des comportements macroscopiques, où le matériau est considéré comme homogène isotrope. Afin d'étudier le comportement des alliages métalliques à une échelle plus fine, notamment celle des grains, comme cela est fait dans certains travaux concernant la simulation de choc laser [188, 189] qui seront présentés dans la Section 1.7.3, il est nécessaire d'abandonner les modèles précédents et de considérer des lois adaptées.

1.4.1 Comportement élastique d'un grain

Le comportement élastique d'un cristal dépend de sa configuration cristallographique. Suivant les symétries présentées par cette dernière, des termes des tenseurs de rigidité \mathbb{C} et de souplesse \mathbb{S} sont alors nuls. Les formes de ces tenseurs selon le type de maille cristallographique sont résumées dans Nye [142], dont provient la Figure 1.10



FIGURE 1.10 – Formes des tenseurs de rigidité et de souplesse (en convention de Voigt) suivant le type de maille cristallographique [142], exprimées selon les axes cristallins.

Un tenseur isotrope n'est plus adapté pour décrire le comportement élastique à l'échelle d'un grain, dont le comportement n'est pas invariant par rotation.

1.4.2 Modélisation du comportement plastique d'un grain

Les modèles de comportement cristallins décrivent le matériau à l'échelle mésoscopique, en se situant entre les modèles macroscopiques vus en Section 1.3.2, et des modèles de dynamiques des dislocations [138] dont il ne sera pas question dans ce manuscrit. Les mouvements de dislocations se font par cisaillement dans des directions et plans particuliers, qui forment les systèmes de glissement d'une maille cristalline. Ces derniers sont habituellement identifiés par les vecteurs n et t, dénotant la normale au plan de glissement et la direction de glissement respectivement. Afin de caractériser le cisaillement ou cission responsable du mouvement de la dislocation, il est possible de définir la cission résolue τ définie telle que :

$$\tau = \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu},\tag{1.14}$$

où μ est le tenseur de Schmid du plan de glissement désigné par n et t, et défini par :

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2} \left(\boldsymbol{t} \otimes \boldsymbol{n} + \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{t} \right). \tag{1.15}$$

La notation \otimes correspond au produit diadique, défini tel que :

$$(\boldsymbol{t} \otimes \boldsymbol{n})_{ij} = \boldsymbol{t}_i \boldsymbol{n}_j. \tag{1.16}$$

Un système de glissement est activé lorsque la cission résolue lui correspondant dépasse une valeur critique τ_c . A titre d'exemple, un matériau à maille CFC (Cubique Face Centrée) possède douze systèmes de glissement [17, 139], appartenant à la famille {111} (110) (la notation {·} correspond aux normales des plans de glissement, et $\langle \cdot \rangle$ aux directions de glissement).

Une déformation plastique est générée par le déplacement de dislocations. Le formalisme de la plasticité cristalline introduit des multiplicateurs plastiques $\gamma^{(\alpha)}$ propres à chaque systèmes de glissement α . La vitesse de déformation plastique est alors définie par [198] :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{p} = \sum_{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \frac{\partial f^{(\alpha)}}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = \sum_{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)}, \qquad (1.17)$$

où $\mu^{(\alpha)}$ correspond au tenseur de Schmid du système de glissement α . Ainsi, la résolution de la plasticité cristalline revient à trouver les valeurs des différents $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$. Plusieurs modèles de comportement existent alors, et sont abordés dans la partie suivante. Parallèlement, il est possible de définir la vitesse de rotation élastique de la maille cristalline $\dot{\omega}_e$ induite par une déformation plastique [123] :

$$\dot{\boldsymbol{\omega}} = \dot{\boldsymbol{\omega}}^{\mathrm{e}} + \dot{\boldsymbol{\omega}}^{\mathrm{p}},\tag{1.18}$$

avec $\dot{\omega}$ la vitesse de rotation totale, correspondant au gradient antisymétrique du champ de vitesse matérielle v:

$$\dot{\boldsymbol{\omega}} = \frac{1}{2} \left(\nabla \boldsymbol{v} - \nabla^T \boldsymbol{v} \right), \qquad (1.19)$$

où la notation ∇ désigne l'opérateur gradient. $\dot{\omega}^{p}$ correspond à la rotation plastique de la maille cristalline, calculée à l'aide de la relation suivante :

$$\dot{\boldsymbol{\omega}}^{\mathrm{p}} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \boldsymbol{\mu}_{\mathrm{antisym}}^{(\alpha)}, \qquad (1.20)$$

où μ_{antisym} est la partie anti-symétrique du tenseur de Schmid :

$$\boldsymbol{\mu}_{\text{antisym}} = \frac{1}{2} \left(\boldsymbol{t} \otimes \boldsymbol{n} - \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{t} \right)$$
(1.21)

1.4.2.1 Lois de comportement avec seuil

Certaines modélisations de la plasticité cristalline adoptent des lois à seuil, définissant un ensemble de valeur de contraintes pour lesquelles le matériau se comporte de manière purement élastique. Le seuil utilisé est celui de la loi de Schmid [10, 149, 198] :

$$f(\boldsymbol{\sigma}) = \max_{\alpha} f^{(\alpha)}(\boldsymbol{\sigma}) = \max_{\alpha} \left| \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} \right| - g^{(\alpha)} = \max_{\alpha} \left| \boldsymbol{\tau}^{(\alpha)} \right| - g^{(\alpha)}.$$
 (1.22)

La plasticité au sens de la loi de Schmid survient donc dès que la cission résolue sur l'un des systèmes α de glissement dépasse la cission critique $g^{(\alpha)}$ de ce système. Cette fonction seuil décrit un polyèdre dans l'espace des contraintes [24]. L'expression de f de l'Equation (1.22) est toutefois problématique lorsque l'on cherche à la différencier afin d'utiliser la règle de normalité, car elle n'est pas différentiable. Il y a en particulier une indétermination des systèmes de glissement activés pour un point se situant à un sommet du polyèdre décrit par le critère de plasticité. Certains travaux présentent donc une version dite régularisée de ce critère afin de le rendre différentiable et de lever l'indétermination des systèmes de glissement activés pour des points sur les sommets de la surface de charge [10, 56, 198] :

$$f_{p_1}^{\text{reg}} = \left(\sum_{\alpha} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{p_1} \right)^{\frac{1}{p_1}} - 1, \qquad (1.23)$$

 p_1 étant un réel positif. La Figure 1.11 illustre l'approximation de la surface seuil en plasticité cristalline par l'Equation (1.23) pour différentes valeurs de p_1 (notée p sur la figure 1.11).



FIGURE 1.11 – Illustration des surfaces seuils issues de la loi de Schmid régularisée [149].

A partir de l'expression de la loi de Schmid régularisée de l'équation (1.23), Yoshida et al. [198] ont déterminé des expressions analytiques des inconnues du problème. Ainsi, les multiplicateurs plastiques des systèmes de glissement sont donnés par :

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \frac{\dot{\Lambda}}{g^{(\alpha)}} \left(\frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}}\right)^{p_1},\tag{1.24}$$

où Λ peut être assimilé à un multiplicateur plastique global tel que :

$$\dot{\Lambda} = \frac{\boldsymbol{G} : \mathbb{C} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}{\boldsymbol{G} : \mathbb{C} : \boldsymbol{G} + \boldsymbol{H}},\tag{1.25}$$

où

$$\boldsymbol{G} = \sum_{(\alpha)} \left[\left(\frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right)^{p_1 - 1} \frac{\boldsymbol{\mu}^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right] \quad \text{et} \quad \boldsymbol{H} = \sum_{(\alpha)} \left[\left(\frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right)^{p_1} \frac{1}{g^{(\alpha)}} \sum_{\beta} \left(\frac{h^{(\alpha\beta)}}{g^{(\beta)}} \left(\frac{\left| \tau^{(\beta)} \right|}{g^{(\beta)}} \right)^{p_1 - 1} \right) \right], \quad (1.26)$$

avec $h_{\alpha\beta}$ désignant les coefficients d'une matrice d'écrouissage. Cette notion est détaillée dans la Section 1.4.2.3. Ces quantités permettent par ailleurs de définir le module tangent élasto-plastique \mathbb{L} :

$$\mathbb{L} = \mathbb{C} - \frac{(\mathbb{C} : \mathbf{G}) \otimes (\mathbf{G} : \mathbb{C})}{\mathbf{G} : \mathbb{C} : \mathbf{G} + \mathbf{H}}.$$
(1.27)

Il existe néanmoins d'autres modèles de comportement en plasticité cristalline, qui ne font pas appel à une formulation à seuil, et sont dits visco-plastiques.

1.4.2.2 Lois de comportement visco-plastique

Les lois de comportement dites élasto-visco-plastiques en plasticité cristalline ont une formulation sans seuil, et font intervenir intrinsèquement une influence de la vitesse de déformation. Un modèle particulièrement utilisé est celui développé par Hutchinson [90], qui propose la formulation suivante :

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0 \text{signe}\left(\frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}}\right) \left|\frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}}\right|^{m_1} = \dot{\gamma}_0 \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \left|\frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}}\right|^{m_1 - 1},\tag{1.28}$$

où $\dot{\gamma}_0$ et m_1 sont des paramètres du modèles, et signe(·) une fonction telle que :

signe(x) =
$$\begin{cases} 0 & \text{si } x = 0 \\ 1 & \text{si } x > 0 \\ -1 & \text{si } x < 0. \end{cases}$$
 (1.29)

Avec cette formulation, la quantité $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ n'est donc jamais nulle (pour $\tau^{(\alpha)} \neq 0$). Cependant, les valeurs de *m* étant généralement grandes ($m_1 > 10$), $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ reste très petit tant que $\tau^{(\alpha)}/g^{(\alpha)}$ est inférieur à 1. La loi de comportement (1.28) est ensuite reprise dans de nombreux travaux [11, 139, 150].

Parallèlement, Méric et al. [136] ont développé une loi similaire :

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \text{signe}\left(\tau^{(\alpha)} - x^{(\alpha)}\right) \left\langle \frac{|\tau^{(\alpha)} - x^{(\alpha)}| - g^{(\alpha)}}{K} \right\rangle^{n_1}, \qquad (1.30)$$

où K et n_1 sont des paramètres du modèles, $x^{(\alpha)}$ est une variable d'écrouissage cinématique. La notation $\langle . \rangle$, dite de Macaulay, est définie par

$$\langle x \rangle = \frac{1}{2} (|x| + x).$$
 (1.31)

Contrairement à la loi (1.28), la loi (1.30) définit donc un seuil, en dessous duquel aucune déformation plastique n'est générée. Une loi similaire a été proposée par Forest and Rubin [68], qui est cependant indépendante de la vitesse de déformation.

On peut remarquer que les formes des lois (1.28) et (1.30) sont similaires à celle de la loi d'Odqvist, qui est une généralisation de la loi de Norton à des trajets de chargement multiaxiaux en viscoplasticité macroscopique [117] :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p = \frac{3}{2} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_0 \left(\frac{\sigma_{\rm eq}}{\sigma^*}\right)^N \frac{\boldsymbol{\sigma}^d}{\sigma_{\rm eq}},\tag{1.32}$$

où $\dot{\varepsilon}_0$ est une vitesse de déformation de référence, N et σ^* sont des paramètres de la loi, σ_{eq} la contrainte équivalente et σ^d la partie déviatorique du tenseur des contraintes. Une formulation équivalente existe avec l'ajout d'un domaine élastique :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{p} = \frac{3}{2} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{0} \left\langle \frac{\sigma_{\mathrm{eq}} - k}{\sigma_{Y}} \right\rangle^{N} \frac{\boldsymbol{\sigma}^{d}}{\sigma_{\mathrm{eq}}}, \tag{1.33}$$

avec σ_Y la limite élastique du matériau.

Enfin, une dernière famille de formulations propose une modélisation plus proche de la physique [36, 38, 122], se basant sur des mécanismes d'activation thermique des systèmes de glissement. La quantité $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ est alors exprimée par

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0 \text{signe}(\tau^{(\alpha)}) \exp\left[-\frac{G_0}{k_b T} \left\langle 1 - \left\langle \frac{\left|\tau^{(\alpha)}\right| - \tau_{\rho}^{(\alpha)}}{\tau_l^{(\alpha)}}\right\rangle^{p_2} \right\rangle^{q_1}\right],\tag{1.34}$$

où k_b est la constante de Boltzman, T la température, G_0 est l'énergie de la barrière thermique, $\dot{\gamma}_0$ est une vitesse de déformation de référence, $\tau_l^{(\alpha)}$ est la résistance au cisaillement de la maille, et $\tau_{\rho}^{(\alpha)}$ est une résistance au cisaillement reflétant la densité de dislocations. Les exposants p_2 et q_1 sont des paramètres. Le modèle (1.34) peut être enrichi avec une description plus poussée des termes τ_{ρ} et τ_l modélisant l'influence de la densité de dislocations et des effets de taille des grains sur la résistance à la cission des systèmes de glissement [102].

Le formalisme de la plasticité cristalline admet également une modélisation de l'écrouissage, au travers de lois d'évolution de la cission critique.

1.4.2.3 Plasticité cristalline et écrouissage

Il est possible d'introduire une loi d'écrouissage pour l'évolution de la cission critique $g^{(\alpha)}$. Les lois d'écrouissages utilisées différencient les écrouissages dits latents (écrouissage d'un système de glissement par un autre système de glissement) et les auto-écrouissages (écrouissage d'un système de glissement sur lui-même). Selon la formulation donnée dans Asaro and Needleman [11] (voir aussi [70–72]) nous avons :

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \left| \dot{\gamma}^{(\beta)} \right|.$$
(1.35)

Les coefficients $h_{\alpha\beta}$ forment une matrice d'écrouissage. Une approche classique est de considérer :

$$h_{\alpha\beta} = qh(\gamma) + (1-q)h(\gamma)\delta_{\alpha\beta}, \qquad (1.36)$$

où $\delta_{\alpha\beta}$ désigne le symbole de Kronecker, q est un paramètre et $h(\gamma)$ est une fonction d'écrouissage donnée par :

$$h(\gamma) = h_0 \operatorname{sech}^2\left(\frac{h_0\gamma}{g_s - g_0}\right).$$
(1.37)

Dans l'équation (1.37), la notation « sech » fait référence à la fonction sécante hyperbolique, h_0 est un paramètre d'écrouissage, g_0 est la cission critique initiale tandis que g_s est la valeur de la cission critique saturée. Méric et al. [136] ont de leur côté procédé à une détermination expérimentale des coefficients de la matrice d'écrouissage. Breumier et al. [32] utilisent une autre forme d'écrouissage proche d'une loi de Voce :

$$g^{(\alpha)} = g_0 + \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \left(R_{\beta} - g_0 \right), \qquad (1.38)$$

avec

$$R_{\beta} = g_0 + Q \left(1 - e^{-|\gamma^{(\beta)}|b} \right), \qquad (1.39)$$

où Q et b sont des paramètres de la loi.

1.4.3 Modélisation géométrique d'un polycristal

La réalisation de simulations en champs complets (i.e. qui calculent les champs mécaniques locaux) implique de représenter géométriquement le polycristal dans les simulations. Une technique maintenant abondamment utilisée est celle de la tesselation de Voronoi [27, 194, 203]. Cette méthode consiste à subdiviser le plan ou l'espace en un grand nombre de polygones, sans recouvrement et sans laisser d'espaces vides. Cette modélisation introduit une notion d'aléatoire dans le nombre et dans la position des grains, que l'on retrouve également dans une microstructure réelle.

Un grain dans une tesselation de Voronoi est initialement représenté par un point, appelé germe. Un grain dans une tesselation de Voronoi est donc constitué de tous les points de l'espace ou du plan plus proche de son germe que de toutes les autres [144]. Cela donne lieu à des tesselations de Voronoi isotropes. Les microstructures métalliques sont cependant complexes, et peuvent exhiber des orientations ou formes de grains préférentielles, notamment à cause des procédés de mise en forme. Cet aspect peut être pris en compte, par exemple en faisant croître les grains à partir de leur germe, et en imposant des vitesses de croissance différentes selon les directions [141]. Les résultats d'une telle procédure sont illustrés dans la Figure 1.12.



FIGURE 1.12 – Elaboration d'une représentation de Voronoi anisotrope d'une microstructure [141] : (a) observation EBSD de la microstructure, (b) identification du contour des grains, (c) tesselation de Voronoi anisotrope, (d) coloration selon les orientations cristallines.

La Figure 1.12(a) présente un exemple de microstructure (ici microstucture WAAM, Wire + arc additively manufactured). Cette image fait apparaître de nombreux grains, dont les couleurs indiquent l'orientation cristallographique. La représentation géométrique dans les simulations doit donc suivre celle de la microstructure du matériau modélisé.

Il est possible de contrôler la modélisation de la microstructure en paramétrant le nombre de grains, ainsi que leur distribution spatiale (uniforme ou non). D'autres tesselations que celle de Voronoi existent. Le diagramme de Laguerre [195] utilise une définition différente de la distance utilisée pour attribuer un point à un grain, permettant de modifier la taille des grains. La tesselation de Johnson-Mehl [137] introduit une notion de non-simultanéité de la croissance des grains. Certains grains commencent à croître dès le début de la procédure générant la microstructure, tandis que la croissance d'autres est décalée. Ce faisant, des grains de tailles différentes sont obtenus.

Avant de pouvoir réaliser des simulations de grenaillage laser, il est nécessaire de disposer des bonnes valeurs pour les paramètres des lois de comportement. La méthode d'identification de ces paramètres sera maintenant brièvement présentée.

1.5 Mesures de vitesse en face arrière par VISAR

Afin de réaliser des simulations aussi pertinentes que possible, les paramètres des lois de comportement utilisées doivent être identifiés pour des chargements représentatifs des conditions du choc laser. Il est difficile de réaliser des tests mécaniques standards (avec des barres de Hopkinson notamment, ou avec un test d'expansion d'anneau [91]) aux très grandes vitesses de déformation du choc laser $(\geq 10^6 \text{ s}^{-1})$. Il est néanmoins possible d'obtenir des informations in situ sur les champs mécaniques générés par le choc laser, au travers de mesures de vitesse en face arrière. Cette grandeur correspond à la vitesse de la face libre d'un échantillon opposée à la face sur laquelle est appliquée l'impact laser. Un signal de vitesse en face arrière contient donc des informations sur la propagation de l'onde de contrainte à l'intérieur de la cible. Une manière de mesurer cette vitesse en face arrière est l'utilisation de la vélocimétrie Doppler, ou Velocity Interferometer System for Any Reflector (VISAR), dont le principe est illustré sur la Figure 1.13.



FIGURE 1.13 – Illustration du principe de la mesure VISAR [162].

La vitesse de la face arrière induit un changement de longueur d'onde du laser de mesure qui vient se réfléchir sur la face arrière de la cible. Cette différence de longueur d'onde est captée par une sonde, puis transmise dans un interféromètre, permettant de remonter à la vitesse ayant causé la différence de longueur d'onde. Plus de détails peuvent être trouvés dans les travaux de Rondepierre [162], le Bras [29] et Sollier [178]. Ces travaux présentent également d'autres systèmes de mesure de vitesse en face arrière (capteur piezoélectrique PVDF, jauge EMV et Vélocimétrie Hétérodyne, voir les travaux de Scius-Bertrand [170]).

Ces mesures de vitesse en face arrière (qui est de l'ordre de 100 m/s) permettent d'identifier les paramètres matériaux pour une loi de comportement donnée dans les conditions du choc laser. En reproduisant l'installation expérimentale numériquement, le profil de vitesse en face arrière peut être calculé. Les paramètres matériaux sont ensuite ajustés de sorte que les profils numériques et expérimentaux correspondent. Une telle comparaison est illustrée sur la Figure 1.14.



FIGURE 1.14 – Illustration d'une comparaison de profils de vitesse en face arrière expérimentaux et numériques [172] pour un échantillon d'Aluminium pur.

Sur la Figure 1.14, chaque pic correspond à une réflexion de l'onde de contrainte sur la face arrière de l'échantillon. Ce type de résultats permet également d'observer le précurseur élastique, qui désigne la plus petite valeur de vitesse (ou contrainte) nécessaire pour faire plastifier le matériau. Dans la Figure 1.14, ce dernier est situé à environ 100 ns, pour une valeur d'environ 30 m/s. Les éléments sont maintenant réunis pour pouvoir présenter des résultats de modélisations du grenaillage laser.

1.6 Quelques résultats théoriques sur le choc laser

Un des travaux pionniers de la simulation de choc laser est celui de Ballard [18]. Ce dernier développe une approche complète, théorique et numérique, du choc laser, de la modélisation de la propagation d'onde à celle des contraintes résiduelles. En se plaçant dans le cadre simple mais suffisant d'un matériau élastique isotrope décrit par la loi de Hooke, avec un comportement élastique parfaitement plastique, Ballard utilise notamment la méthode des caractéristiques pour résoudre le système d'équations différentielles de la propagation d'ondes de contraintes, et pour fournir une solution analytique exacte pour une sollicitation en créneau dans un cas 1D (propagation selon l'axe x de la Figure 1.15).



FIGURE 1.15 – Solution théorique de la propagation d'une onde de contrainte dans un matériau élastique parfaitement plastique soumis à un chargement en créneau. (a) Diagramme x - t de la propagation élasto-plastique d'une onde de contrainte. (b) Profil spatial de la propagation d'une onde de contrainte à différents instants de la propagation (annoté à partir de [18]).

La résolution analytique illustrée en Figure 1.15 est particulièrement utile pour juger de la pertinence d'une méthode numérique afin de modéliser le choc laser, ce qui est présenté en Annexe A. Ces résultats prédisent l'apparition d'un précurseur élastique (observé expérimentalement sur la Figure 1.14) sur la Figure 1.15(b) au niveau de la partie en avant à droite de chaque profil. Ici, le précurseur correspond à la valeur de contrainte axiale minimum plastifiant le matériau. Aussi dénommée Hugoniot Elastic Limit (HEL), cette valeur, notée dans la suite σ_{HEL} a pour expressions (en fonction des différents paramètres élastiques)

$$\sigma_{\text{HEL}} = \left(1 + \frac{\lambda}{2\mu}\right)\sigma_Y = \left(\frac{2}{3} + \frac{\kappa}{2\mu}\right)\sigma_Y = \frac{1 - \nu}{1 - 2\nu}\sigma_Y,\tag{1.40}$$

avec λ le premier coefficient de Lamé, μ le deuxième coefficient de Lamé, aussi appelé module de cisaillement, κ le module de compressibilité, ν le coefficient de Poisson et σ_Y la limite élastique du matériau.

De manière générale, la vitesse de propagation d'une onde de contrainte en traction/ compression dans un matériau isotrope, aussi appelée vitesse du son d'un matériau, est donnée par la relation

$$c = \sqrt{\frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon}},\tag{1.41}$$

où ρ désigne la masse volumique du matériau, σ la contrainte dans la direction du choc laser, et ε la déformation dans la même direction. Lorsque le comportement du matériau est élastique isotrope, on retrouve

$$C_{\rm el} = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}} = \sqrt{\frac{1}{\rho} \left(\kappa + \frac{4\mu}{3}\right)} = \sqrt{\frac{1}{\rho} \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)}},$$
(1.42)

où E est le module de Young du matériau. Pour la plupart des matériaux subissant un écrouissage, la plasticité s'accompagne d'une diminution du module tangent du matériau, et donc de la vitesse de propagation de l'onde de contrainte. Ainsi, la partie dite « plastique » de l'onde (délimitée par les valeurs de contraintes faisant plastifier le matériau) se propage moins vite que la partie de l'onde dite « élastique ». Le précurseur élastique apparaît en conséquence de ces écarts de vitesses de propagation. La Figure 1.15(a) met également en lumière des comportements particuliers si le matériau plastifie lors de la décharge. Toujours d'après Ballard [18], cela a lieu si l'amplitude de l'onde de pression Pest telle que

$$P \ge 2\sigma_{\text{HEL}}.$$
 (1.43)

Le front de décharge élastique, se propageant plus vite que le front de charge plastique, va rattraper ce dernier. Leur interaction est semblable à une onde arrivant à une interface entre deux matériaux d'impédances différentes : il en résultera une onde transmise et une onde réfléchie. Dans le cas présent, une partie de la décharge élastique est réfléchie vers le front de décharge plastique, tandis que le front de charge plastique est atténué. Il s'ensuit un phénomène de va-et-vient du front de décharge élastique, qui « rebondit » entre les front plastiques qui l'entourent, jusqu'à prendre le dessus, correspondant à l'instant à partir duquel l'onde est atténuée à un niveau ne plastifiant plus le matériau. Pour des plages de pressions appliquées vérifiant l'Equation (1.43), la déformation plastique induite dans le matériau sature et adopte une valeur indépendante, notée $\varepsilon_{p,\max}$ de la pression :

$$\varepsilon_{p,\max} = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{\mu} + \frac{4}{3\kappa} \right) \sigma_Y. \tag{1.44}$$

Il est raisonnable de s'attendre à ce que cette propriété ait des conséquences sur les contraintes résiduelles, qui sont directement liées au champ de déformations plastiques et en particulier à leur hétérogénéité.

Un autre résultat intéressant de la thèse de Ballard [18] est la détermination de plage de pressions définissant certains comportements du matériau :



FIGURE 1.16 – Différents comportement d'un matériau sous choc en fonction de la pression appliquée et du temps écoulé, pour un acier de type 12Cr [18].

Ballard identifie notamment un régime de faibles pressions en dessous desquelles le comportement hydrodynamique du matériau peut être négligé, et le comportement élastique peut être modélisé sans avoir recours à une équation d'état. De manière générale, sa condition est donnée par :

$$P < 0.1\kappa = 0.1\left(\lambda + \frac{2}{3}\mu\right). \tag{1.45}$$

Ces résultats théoriques permettent d'affiner la compréhension de la propagation de l'onde de contrainte élasto-plastique durant le grenaillage laser, et de mieux interpréter des résultats de simulations, qui vont maintenant être présentés.

1.7 Simulations numériques du grenaillage laser

Les simulations numériques jouent un rôle prépondérant dans l'étude du grenaillage laser. Elles permettent d'affiner la compréhension des phénomènes physiques là où des mesures expérimentales sont impossibles, ainsi que des prédimensionnements là où des procédures expérimentales seraient trop longues et trop coûteuses.

1.7.1 Modélisation par Elements Finis du choc laser

Une seconde avancée significative dans le domaine de la simulation de choc laser est due à Braisted [28], qui réalise des simulations par éléments finis (EF) de la propagation d'ondes de contraintes induites par choc laser, et des contraintes résiduelles en résultant. Les problématiques principales à résoudre pour aboutir à une simulation précise du choc laser sont :

- Comment faire en sorte que l'énergie cinétique du système se dissipe ? En effet, les contraintes résiduelles correspondent à un équilibre statique.
- Quelle procédure utiliser afin de simuler le retour à l'équilibre statique du matériau, durant laquelle les contraintes résiduelles s'équilibrent dans le matériau, et dont la durée est plus longue de quelques ordres de grandeurs que l'impact laser (quelques dizaines de nanosecondes pour l'impact, contre quelques dizaines de microsecondes, voire millisecondes pour la redistribution des contraintes).

Afin de répondre à ces questions, Braisted [28] introduit l'usage d'éléments dits « infinis » servant de conditions aux limites non-réflectives, qui permettent à l'onde de se propager à l'infini dans le matériau. Cette méthode permet de dissiper l'énergie cinétique après le passage initial de l'onde, et de s'assurer que le champ des déformations plastiques n'est pas modifié de manière non physique par des réflexions contre les bords du domaine. Ce type de maillage est illustré dans la Figure 1.17.



FIGURE 1.17 – Illustration du type de maillage utilisé pour les simulations de choc laser [28].

La problématique de la procédure numérique pertinente à utiliser afin d'aboutir aux résultats se ramène à la différence entre résolution explicite ou implicite des systèmes d'équations aux dérivées partielles. Lors d'une résolution explicite, les dérivées spatiales sont évaluées à l'instant précédent de la simulation, avec des grandeurs alors connues. L'expression des inconnues à l'instant suivant dépend donc explicitement de l'état du système au temps précédent. A l'inverse, dans une résolution implicite, les dérivées spatiales sont évaluées à l'instant suivant, et font intervenir les inconnues à déterminer, ramenant la résolution à un système nécessitant l'inversion d'une matrice. Cette opération, lourde numériquement, n'est pas nécessaire avec une méthode explicite, qui doit néanmoins vérifier certaines conditions afin d'être stable : plus le maillage est fin, plus le pas de temps doit être faible, ce qui conduit à des simulations avec plus d'incréments, et donc plus longues. Une telle condition n'est pas nécessaire pour les méthodes implicites.

La solution présentée par Braisted [28] est de réaliser l'ensemble de la simulation en deux étapes : une étape explicite durant laquelle l'onde de contraintes est propagée et induit des déformations plastiques, puis une étape implicite durant laquelle les contraintes résiduelles sont calculées (en l'absence de chargement extérieur). Bien que n'ayant pas utilisé de modèle de comportement dépendant de la vitesse de déformation, Braisted [28] valide la stratégie numérique avec des mesures expérimentales de contraintes résiduelles, comme présenté sur la Figure 1.18.



FIGURE 1.18 – Comparaison de contraintes résiduelles obtenues numériquement et expérimentalement [28]. (a) comparaison des contraintes résiduelles expérimentales et numériques en surface; (b) comparaison des contraintes résiduelles expérimentales et numériques dans l'épaisseur.

1.7.2 Etudes numériques de l'influence des paramètres du choc laser

Cette stratégie de simulation numérique a ensuite été reprise dans de nombreux travaux [152, 153, 155]. Certains de ces travaux présentent des variations vis à vis de la méthodologie présentée précédemment, plus précisément concernant l'usage de procédures explicites ou implicites. Peyre et al. [155] utilisent une procédure explicite pour toute la durée de la simulation. Une alternative existe également pour l'usage d'éléments infinis : Bhamare et al. [23] mentionnent l'introduction de viscosité artificielle dans une étape de calcul à la suite de celle de l'introduction de déformations plastiques, permettant d'amortir l'onde de contrainte et donc de faire tendre l'énergie cinétique vers zéro.

Ces modèles de simulations peuvent donc servir à étudier l'influence des paramètres du procédé, tels que le nombre de tirs sur une cible, le taux de recouvrement, le motif de recouvrement ainsi que la forme de la tache laser. Xiang et al. [196] présentent notamment des conclusions selon lesquelles la forme de la tache laser (circulaire ou carrée) a peu d'influence sur les contraintes résiduelles pour un mono-impact, mais un traitement avec recouvrement utilisant une tache carrée semble plus efficace qu'avec une tache circulaire. Un motif de recouvrement en zigzag, ou serpent semble être optimal pour introduire des contraintes résiduelles de compression sur une plus grande épaisseur (0.41 mm contre 0.34 mm pour les autres motifs). Ces résultats sont illustrés dans la Figure 1.19.



FIGURE 1.19 – Résultats numériques de l'influence du taux de recouvrement et du profil de recouvrement sur les contraintes résiduelles [196]. (a) Influence du motif de recouvrement sur les contraintes résiduelles en surface. (b) Influence du motif de recouvrement sur les contraintes résiduelles en profondeur. (c) Influence du taux de recouvrement sur les contraintes résiduelles en surface. (d) Influence du taux de recouvrement sur les contraintes résiduelles en surface. (d) Influence du taux de recouvrement sur les contraintes résiduelles en pro-

Ces résultats sont toutefois à mettre en perspective avec les travaux de Adu-Gyamfi et al. [3], qui présentent une influence plus modérée du motif de recouvrement. Ces auteurs ont néanmoins poussé l'étude jusqu'à la tenue en fatigue, et concluent que le motif de recouvrement en spirale appliqué sur des faces opposées d'une éprouvette confère une meilleure durée de vie, car il permet de limiter la valeur des contraintes résiduelles de traction (qui apparaissent par équilibrage des contraintes) au centre de l'échantillon. L'influence de la forme de la tache laser (circulaire ou carrée) est également discutée dans Cao et al. [39] et Kim et al. [104]. En particulier, Kim et al. [104] indiquent que pour des maillages et durée de chargement égaux, la forme de la tache laser influence la distribution des contraintes résiduelles dans l'épaisseur de l'échantillon, mais pas la valeur des contraintes résiduelles en surface.

De plus, dans la lignée de la réflexion de Ballard [18] sur la modélisation hydrodynamique du matériau par une équation d'état, Chaieb [44] montre qu'une modélisation du comportement élastique avec une équation d'état ou avec la loi de Hooke mène à des résultats similaires concernant les champs résiduels de déformations plastiques et de contraintes résiduelles, comme cela est montré dans la Figure 1.20.



FIGURE 1.20 – Influence de l'utilisation d'une équation d'état sur les champs résiduels de déformations plastiques et de contraintes résiduelles [44]. (a) Déformation plastique. (b) Contraintes résiduelles.

Ces résultats étant obtenus sur un acier C75 et pour une pression de 4 GPa, ils valident l'analyse de [18] illustrée en Figure 1.16, puisque la pression appliquée est inférieure à 0.1κ , qui est une condition pour que le comportement hydrodynamique du matériau puisse être négligé.

Enfin, à l'image des résultats de la Figure 1.18, plusieurs travaux [23, 152, 153, 155] montrent des comparaisons directes entre contraintes résiduelles obtenues expérimentalement par diffraction des rayons X (DRX) et numériquement. Ces mesures expérimentales sont en réalité des moyennes sur la zone irradiée comme le soulignent Morin et al. [133] et Brockman et al. [34]. Une comparaison entre des valeurs locales fournies par la simulation numérique et des valeurs moyennes expérimentales, bien qu'indicatrices de la justesse des simulations, peut gagner en pertinence par la prise en compte de cet effet de moyenne. Ces aspects sont traités dans certains travaux [8, 34], qui modélisent l'opération de moyenne de la mesure expérimentale, tel qu'illustré sur la Figure 1.21.



FIGURE 1.21 – Comparaisons des contraintes résiduelles de surface expérimentales et numériques, avec recouvrement, avec et sans opération de moyenne [34].

Enfin, les travaux récents de Ayad et al. [14] étudient le comportement sous choc d'un joint de soudure obtenu par le procédé Friction Stir Welding (FSW). Une particularité de ce procédé est de générer des grains de forme allongée dans la direction de roulement du procédé, tel qu'illustré sur la Figure 1.22(a). L'identification des paramètres de Johnson-Cook à partir de profils de vitesse en face arrière pour des tirs laser effectués parallèlement et perpendiculairement à la direction des grains révèle des comportements différents selon l'orientation des grains, comme représenté sur la Figure 1.22(b).



FIGURE 1.22 – Procédé de soudage FSW et influence sur les propriétés mécaniques utiles pour la simulation du choc laser [14]. (a) Image EBSD d'une coupe de la soudure par FSW entre des alliages d'Aluminium AA7075 et AA2017. (b) Représentation de la variation relative des paramètres du modèle de Johnson-Cook selon les directions d'application du choc (axiale et transversale) d'un joint FSW sur différents matériaux.

Ces résultats suggèrent qu'il est important de prendre en compte l'influence de l'anisotropie mécanique (liée à la microstructure) sur la propagation de l'onde de contrainte. Notamment, les paramètres identifiés pour le modèle de Johnson-Cook diffèrent selon que le choc se propage dans la section d'un échantillon, ou dans le sens de sa longueur, comme illustré par le Tableau 1.1 :

TABLE 1.1 – Paramètres du modèle de Johnson-Cook obtenus pour l'aluminium AA7075-T6 selon que l'onde de choc se propage dans une section ou dans l'épaisseur de l'échantillon [14].

Direction de propagation	$\rho (\mathrm{kg.m^{-3}})$	μ (GPa)	$c ({\rm m.s^{-1}})$	A (MPa)	B (MPa)	C	n
section	2800	30	5000	400	800	0.05	0.45
longueur	2820	31	5150	473	210	0.033	0.3813

Sans prétendre avoir été exhaustive, cette partie a visé à présenter l'état de l'art des simulations de contraintes résiduelles par choc laser. La simulation du choc laser par une approche macroscopique est largement utilisée et peut être considérée comme aboutie, une voie d'amélioration se situe dans la compréhension des phénomènes à une échelle inférieure, et dans des meilleures comparaisons expériences-résultats, dont une source d'écart est la différence d'échelle entre les résultats numériques et expérimentaux.

1.7.3 Prise en compte de la nature cristalline du matériau

Afin de faire le lien avec la Section 1.4, il convient de mentionner des exemples d'études et de simulations dynamiques incorporant des éléments de comportement des polycristaux. Le but de ces simulations est d'étudier une éventuelle influence de la microstructure dont sont composés les échantillons métalliques élasto-plastiques dans lesquels une onde de contrainte est propagée. Cette influence peut concerner la propagation en elle-même, mais également la distribution des contraintes résiduelles.

Les travaux de Vukelic et al. [188] s'intéressent à la simulation d'un choc laser sur un monocristal. Les auteurs s'intéressent notamment à la rotation de la maille cristalline induite par un choc laser (dont le diamètre est d'une dizaine de micromètres), qui est un marqueur de la déformation plastique du matériau, tel qu'illustré sur la Figure 1.23.



FIGURE 1.23 – Cartographie de la rotation de la maille cristalline induite par un choc laser : (a) pour l'orientation (110), (b) pour l'orientation (1 $\overline{10}$) [188].

La Figure 1.23 montre qu'un choc laser peut introduire des rotations de la maille cristalline de l'ordre de quelques degrés, avec des distributions présentant des plans d'antisymétrie ou non selon les orientations de l'échantillon. Réalisés pour une distribution spatiale de pression de forme gaussienne, ces résultats montrent que la rotation de la maille cristalline est particulièrement prononcée sur les bords de la tache laser, qui sont soumis à un fort état de cisaillement. Des simulations similaires réalisées pour un échantillon composé de deux cristaux avec des orientations différentes montrent des variations abruptes de la rotation de la maille cristalline au niveau du joint de grain, comme illustré sur la Figure 1.24 [189].



FIGURE 1.24 – Champ de rotation de la maille cristalline d'un échantillon frappé par un choc laser et composé de deux cristaux avec des orientations différentes [189].

Le champ de contraintes résiduelles correspondant calculé par les auteurs est présenté dans la Figure 1.25.



FIGURE 1.25 – Champ des contraintes résiduelles d'un échantillon frappé par un choc laser et composé de deux cristaux avec des orientations différentes [189].

Il est frappant de remarquer que contrairement au champ des rotations de la maille cristalline de la Figure 1.24, le champ des contraintes résiduelles de la Figure 1.25 ne semble présenter aucune marque de l'hétérogénéité induite par le bicrystal¹. Ce sujet a également été traité de manière analytique par Wang et al. [191], qui montrent notamment que des systèmes de glissement peuvent être activés de manière égale, et activer des systèmes de glissement effectifs.

La problématique de l'influence d'une microstructure a été étudiée récemment de façon approchée. Sunny et al. [183] ont considéré une description hétérogène du matériau sous la forme d'un volume élémentaire représentatif contenant des grains, lequel est ensuite soumis à un chargement représentatif d'un choc laser. Cependant, ces auteurs n'ont pas adopté un modèle de plasticité cristalline, mais ont considéré pour les grains un comportement macroscopique de type Johnson-Cook, dont le paramètre A de l'équation (1.10) peut varier selon les grains. Malgré cette modélisation approchée du polycristal, les auteurs observent une influence importante de la prise en compte d'une microstructure hétérogène, qui introduit de fortes hétérogénéités dans le champ de déformations plastiques, tel qu'illustré sur la Figure 1.26.

^{1.} La légende de la figure 1.25 dans l'article dont cette dernière est tirée fait mention d'une cartographie des résultats directs et moyennés, sans que la figure de l'article ne corresponde à sa description. Il n'est pas clair si les résultats de la Figure 1.25 ont été moyennés ou non, ou comment cette moyenne a été réalisée.

1.7. SIMULATIONS NUMÉRIQUES DU GRENAILLAGE LASER



FIGURE 1.26 – Champ de déformation plastique équivalente avec et sans prise en compte de la microstructure [183].

Ces résultats sont obtenus pour un Inconel, avec une taille de grain moyenne de 250 μ m, et pour une tâche laser de diamètre 1 mm. La taille de la tache laser est donc supérieure à la taille des grains d'un ordre de grandeur, l'onde de pression se propage donc à travers plusieurs grains simultanément.

Segurado and Lebensohn [173] se sont intéressés au comportement acoustique d'une structure polycristalline (1D et 3D) lors de la propagation d'une onde élastique, en se basant sur la méthode FFT (Fast Fourrier Transform). Les auteurs mettent en avant une influence de la longueur d'onde du signal se propageant sur la dispersion de l'onde. Plus la longueur d'onde se rapproche de la taille caractéristique de la microstructure, plus l'onde perd de sa cohérence au fur et à mesure de la propagation. L'anisotropie des grains brise également la symétrie des diagrammes de dispersion.

Ces aspects sont par ailleurs étudiés dans les travaux de Lloyd et al. [121] via des simulations 1D en champ complet de polycristaux basées sur les différences finies, avec un modèle viscoplastique basé sur les mouvements et interactions de dislocations ainsi qu'une équation d'état de Birch-Murnaghan, mais pour des amplitudes des ondes de pression bien plus élevées. Là où l'amplitude utilisée dans Vukelic et al. [188] était d'environ 2.7 GPa, cette dernière peut monter ici jusqu'à 110 GPa. Les auteurs montrent l'influence de la microstructure et de l'orientation préférentielle de grains sur le précurseur élastique, tel que cela est illustré sur la Figure 1.27. Les auteurs insistent donc sur la nécessité de caractériser la microstructure afin de comprendre plus en détail le comportement des ondes de contraintes se propageant dans un matériau métallique.



FIGURE 1.27 – Evolution de la vitesse matérielle pour différentes distributions des orientations cristallines [121]. Sont représentées les réponses pour l'orientation [111], pour 50 distributions d'orientations aléatoires, et pour la moyenne de ces orientations.

Les travaux de Luscher et al. [122] s'intéressent également à la propagation de chocs, d'amplitudes élevées (10 à 110 GPa) dans des monocristaux et bicristaux. En plus de la plasticité cristalline, les auteurs utilisent un formalisme thermodynamique ainsi qu'une équation d'état afin de modéliser les évolutions d'énergie et de température. Ces travaux sont semblables à ceux de Johnson [94], qui proposent des résultats analytiques pour la propagation d'onde élasto-plastique dans du beryllium, avec un modèle de plasticité basé sur la densité et vitesse moyenne de dislocations. Un exemple de résultat est illustré dans la Figure 1.28.



FIGURE 1.28 – Comparaison entre les solutions analytiques et numériques pour la propagation d'une onde de contrainte dans un monocrystal, avec un système de glissement unique formant des angles de 10° , 30° et 45° avec la direction du choc [94].

Des résultats expérimentaux similaires sont obtenus par Kanel et al. [97], qui ont mesuré les vitesses en face arrière obtenus en impactant à l'aide d'un projectile un monocristal de Magnésium selon plusieurs orientations différentes. Leurs résultats sont présentés sur la Figure 1.29 :



FIGURE 1.29 – Vitesses en face arrière obtenues par impact sur un monocristal de Magnésium selon plusieurs orientations Kanel et al. [97].

Les résultats de la Figure 1.29 font apparaître une dépendance de la vitesse de propagation ainsi que de la valeur du précurseur élastique à l'orientation cristalline, soulignant encore une fois l'intérêt de prendre en compte l'anisotropie mécanique due à la microstructure lors des problématiques de choc.

Enfin, certains travaux étudient le comportement sous choc des matériaux à des échelles plus petites encore, en faisant appel aux méthodes numériques de Dynamique Moléculaire [161] et de Dynamique des Dislocations Discrètes [81, 175]. Ces travaux permettent d'étudier le comportement sous choc des dislocations, dont la densité peut augmenter à cause de la déformation plastique due au choc. Des phénomènes d'émission et de nucléation de dislocations peuvent mener à une recristallisation du matériau, ce qui est complexe à modéliser avec les modèles mésoscopiques de plasticité cristalline dont il a été question précédemment. Cependant, ces approches très locales ne sont pas adaptées à la modélisation de microstructures de plusieurs grains. Les simulations de choc laser réalisées aujourd'hui dans la littérature s'appuient pour la majorité sur la méthode des Eléments Finis. Il existent d'autres méthodes numériques possibles afin de simuler un problème de propagation d'une onde de contrainte, que nous allons présenter dans la prochaine section.

1.8 Méthodes numériques pour la propagation d'ondes de contraintes

Nous présentons dans cette partie différentes méthodes numériques permettant de modéliser la propagation d'une onde de contrainte. L'utilisation d'une méthode plutôt qu'une autre se justifie par sa capacité à produire un résultat exempt d'artéfacts numériques. Ces artéfacts numériques peuvent prendre la forme de viscosité ou d'oscillations artificielles. Ces comportements, que l'on souhaite éviter, peuvent apparaître pour des variations rapides de la quantité transportée par l'onde (comme par exemple un changement soudain dans le profil de chargement, ou au niveau d'une interface entre deux milieux d'impédances différentes). En outre, les méthodes numériques explicites doivent respecter la condition CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) assurant leur stabilité :

$$c\frac{\Delta t}{\Delta x} \le 1,\tag{1.46}$$

avec c la vitesse de propagation de l'onde, Δt et Δx les incréments temporels et spatiaux respectivement. La tendance des méthodes numériques à introduire viscosité ou oscillations artificielles est d'autant plus forte que la quantité $c \frac{\Delta t}{\Delta x}$ est faible. Seules des méthodes numériques explicites seront présentées dans ce manuscrit, à l'opposé des méthodes implicites, également utilisables, mais moins adaptées pour des phénomènes rapides de propagation d'onde [174].

1.8.1 Schéma numérique intégré au code commercial ABAQUS/Explicit

La méthode des éléments finis s'est imposée comme un outil incontournable afin de résoudre des problèmes de mécanique, qu'ils soient statiques ou dynamiques. Dans ce dernier cas, l'équation de départ servant à modéliser la propagation d'une onde de contrainte est, dans le cas illustratif d'une propagation à une dimension :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}.$$
(1.47)

u désigne le champ de déplacement, x la coordonnée spatiale, t le temps et c la vitesse de propagation. Avec ce formalisme, le déplacement est la quantité propagée, via une équation différentielle d'ordre 2, qui peut alors être utilisé pour en déduire la déformation via une relation déformation-déplacement, puis la contrainte à l'aide de la loi de comportement choisie. Afin de traiter ce problème par un formalisme Eléments Finis, l'Equation (1.47) est mise sous la forme :

$$M\ddot{\boldsymbol{u}} + \boldsymbol{K}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{f},\tag{1.48}$$

où M est la matrice de masse du système, K la matrice de raideur, u est le vecteur des déplacement inconnus aux nœuds, et f est le vecteur des forces extérieures appliquées aux nœuds. Dans le cas du logiciel commercial ABAQUS/Explicit (utilisé de manière dominante pour la simulation du grenaillage

laser [28, 34, 152]), la résolution d'un problème en dynamique explicite se fait de la manière suivante (section « Explicit dynamic analysis » de [177]) :

$$\begin{cases} \boldsymbol{u}^{n+1} = \boldsymbol{u}^n + \Delta t^n \dot{\boldsymbol{u}}^{n+\frac{1}{2}} \\ \dot{\boldsymbol{u}}^{n+\frac{1}{2}} = \dot{\boldsymbol{u}}^{n-\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t^{n+1} + \Delta t^n}{2} \ddot{\boldsymbol{u}}^n \\ \ddot{\boldsymbol{u}}^n = \boldsymbol{M}^{-1} \left(\boldsymbol{f}^n - \boldsymbol{f}^n_{\text{int}} \right). \end{cases}$$
(1.49)

Dans l'équation (1.49), l'exposant n correspond à l'incrément temporel. Afin d'améliorer la performance de son schéma numérique, ABAQUS/Explicit adapte le pas de temps Δt^n à chaque incrément. f_{int} désigne le vecteur des forces internes, assemblé de sorte à pouvoir se passer de la matrice de raideur. A cela, ABAQUS/Explicit ajoute de la viscosité artificielle, via des paramètres de « linear bulk viscosity » et de « quadratic bulk viscosity », dont le but est d'éviter les variations de volume trop importantes au niveau d'un élément, en particulier pour des chargements en compression. Dans le code commercial ABAQUS/Explicit, le choix de la méthode d'intégration numérique n'est cependant pas laissé à l'utilisateur.

1.8.2 Méthodes basées sur les différences finies

Une manière alternative de modéliser un phénomène de propagation d'onde s'exprime par l'équation suivante [18, 84], toujours dans un cas illustratif $1D^2$:

$$\frac{\partial U}{\partial x} + A \frac{\partial U}{\partial t} = \mathbf{0}, \tag{1.50}$$

avec U le vecteur des inconnues, et A une matrice dépendante du phénomène modélisé. Après discrétisation, on note U_i^n la valeur de l'inconnue à l'incrément temporel n au nœud i. L'équation (1.50), parfois appelée équation d'advection, peut alors être résolue par différents schémas numériques basés sur les différences finies dédiés à cette forme d'équation. Cette approche a des avantages et des inconvénients par rapport à la modélisation Elements Finis présentée dans la Section 1.8.1. La méthode des Elements Finis fait intervenir une equation où la dérivée temporelle seconde de l'inconnue intervient, ce qui ajoute une approximation par rapport à l'Equation (1.50) où seule des dérivées d'ordre 1 interviennent. La méthode des différences finies s'applique naturellement à des maillages rectangulaires et réguliers, des applications à des maillages ne respectant pas ces propriétés étant possibles mais complexes [33, 120, 145] . La forme générale de la solution est la suivante [119] :

$$\boldsymbol{U}_{i}^{n+1} = \boldsymbol{U}_{i}^{n} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\boldsymbol{F}_{i+\frac{1}{2}}^{n} - \boldsymbol{F}_{i-\frac{1}{2}}^{n} \right).$$
(1.51)

Les quantités $\mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}}^{n}$ et $\mathbf{F}_{i-\frac{1}{2}}^{n}$ sont associées à des flux, dont l'expression dépend de la méthode numérique choisie, et Δt et Δx correspondent aux incréments temporels et spatiaux respectivement, tels que $x_{i+1} = x_i + \Delta x$, et $t^{n+1} = t^n + \Delta t$.

^{2.} Les méthodes numériques sont présentées pour un formalisme 1D, mais des versions équivalentes existent pour des modélisations 2D et 3D.

1.8.2.1 Schéma de Lax-Friedrichs

Le schéma de Lax-Friedrichs définit les flux $F_{i-\frac{1}{2}}^n$ et $F_{i+\frac{1}{2}}^n$ comme la moyenne du champ des inconnues des cellules adjacentes au temps précédent :

$$\begin{cases} F_{i-\frac{1}{2}}^{n} = \frac{1}{2} \left(U_{i-1}^{n} + U_{i}^{n} \right) \\ F_{i+\frac{1}{2}}^{n} = \frac{1}{2} \left(U_{i}^{n} + U_{i+1}^{n} \right). \end{cases}$$
(1.52)

Leveque [119] reporte néanmoins que l'utilisation de l'équation (1.52) dans l'équation (1.51) donne des résultats instables, ce qui peut être corrigé en utilisant

$$\boldsymbol{U}_{i}^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\boldsymbol{U}_{i+1}^{n} + \boldsymbol{U}_{i-1}^{n} \right) - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\boldsymbol{F}_{i+\frac{1}{2}}^{n} - \boldsymbol{F}_{i-\frac{1}{2}}^{n} \right).$$
(1.53)

Bien que stable, cette formulation introduit beaucoup de viscosité, et représente donc rarement une bonne alternative pour la résolution de la propagation d'onde.

1.8.2.2 Schéma de Lax-Wendroff

Le schéma de Lax-Wendroff se pose comme une réponse à celui de Lax-Friedrichs. Le flux associé vaut

$$\begin{cases} \boldsymbol{F}_{i-\frac{1}{2}}^{n} = \frac{1}{2}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{U}_{i-1}^{n} + \boldsymbol{U}_{i}^{n}\right) - \frac{1}{2}\frac{\Delta t}{\Delta x}\boldsymbol{A}^{2}\left(\boldsymbol{U}_{i}^{n} - \boldsymbol{U}_{i-1}^{n}\right) \\ \boldsymbol{F}_{i+\frac{1}{2}}^{n} = \frac{1}{2}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{U}_{i}^{n} + \boldsymbol{U}_{i+1}^{n}\right) - \frac{1}{2}\frac{\Delta t}{\Delta x}\boldsymbol{A}^{2}\left(\boldsymbol{U}_{i+1}^{n} - \boldsymbol{U}_{i}^{n}\right). \end{cases}$$
(1.54)

La formulation alternative de Richtmyer décompose le calcul de la solution en deux étapes telles que

$$\begin{cases} \begin{cases} U_{i-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(U_{i}^{n} + U_{i-1}^{n} \right) - A \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(U_{i}^{n} - U_{i-1}^{n} \right) \\ U_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(U_{i+1}^{n} + U_{i}^{n} \right) - A \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(U_{i+1}^{n} - U_{i}^{n} \right) \\ U_{i}^{n+1} = U_{i}^{n} - A \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(U_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - U_{i-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right) \\ \end{bmatrix}$$
(1.55)

A l'inverse du schéma de Lax-Friedrichs, celui de Lax-Wendroff introduit des oscillations artificielles si la solution présente des discontinuités ou des changements de pentes abruptes.

1.8.2.3 Schéma de Godunov

Le schéma de Godunov fait quant à lui intervenir la décomposition spectrale de la matrice A. Définissons les matrices A^+ et A^- suivantes :

$$A^+ = PD^+P^{-1}$$
 et $A^- = PD^-P^{-1}$, (1.56)

avec

$$\boldsymbol{D}_{ij}^{+} = \delta_{ij} \max\left(0, \lambda_{j}\right) \quad \text{et} \quad \boldsymbol{D}_{ij}^{-} = \delta_{ij} \min\left(0, \lambda_{j}\right), \tag{1.57}$$
où λ_j désigne la $j^{i\text{ème}}$ valeur propre de la matrice \boldsymbol{A} , δ_{ij} est le symbole de Kronecker, et \boldsymbol{P} est la matrice de passage de \boldsymbol{A} , dont la $i^{\text{ème}}$ colonne correspond au vecteur propre associé à la $i^{\text{ème}}$ valeur propre. Les matrices \boldsymbol{D}^+ et \boldsymbol{D}^- sont donc des matrices diagonales, dont les composantes sont les valeurs propres positives ou négatives respectivement de la matrice \boldsymbol{A} . Leur somme vérifie donc $\boldsymbol{D} = \boldsymbol{D}^+ + \boldsymbol{D}^-$, \boldsymbol{D} correspondant à la matrice \boldsymbol{A} diagonalisée. Les flux du schéma de Godunov s'expriment alors

$$\begin{cases} F_{i-\frac{1}{2}}^{n} = A^{+}U_{i-1}^{n} + A^{-}U_{i}^{n} \\ F_{i+\frac{1}{2}}^{n} = A^{+}U_{i}^{n} + A^{-}U_{i+1}^{n}. \end{cases}$$
(1.58)

1.8.2.4 Schéma de Godunov à haute résolution

Afin d'améliorer les performances du schéma de Godunov, il est possible de lui ajouter un terme de correction qui aura pour effet de réduire la viscosité artificielle globalement, mais également de l'augmenter là où cela est nécessaire, i.e. là où des changements de pentes se font de manière abrupte. En pratique, cela est effectué avec via une fonction scalaire, appelée limiteur de flux, qui écrête la solution lorsque cette dernière se met à osciller. Les flux s'écrivent alors

$$\begin{cases} F_{i-\frac{1}{2}}^{n} = A^{+}U_{i-1}^{n} + A^{-}U_{i}^{n} + \tilde{F}_{i-\frac{1}{2}}^{n} \\ F_{i+\frac{1}{2}}^{n} = A^{+}U_{i}^{n} + A^{-}U_{i+1}^{n} + \tilde{F}_{i+\frac{1}{2}}^{n}, \end{cases}$$
(1.59)

où $\tilde{F}_{i-\frac{1}{2}}^n$ et $\tilde{F}_{i+\frac{1}{2}}^n$ sont les flux correctifs. Nous ne détaillerons que l'expression de $\tilde{F}_{i-\frac{1}{2}}^n$, celle de $\tilde{F}_{i+\frac{1}{2}}^n$ étant obtenue par simple changement d'indice. Ainsi, selon [118, 119]

$$\widetilde{\boldsymbol{F}}_{i-\frac{1}{2}}^{n} = \frac{1}{2} \sum_{p=1}^{m} \left| \lambda^{(p)} \right| \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left| \lambda^{(p)} \right| \right) \widetilde{\alpha}_{i-\frac{1}{2}}^{(p)} \boldsymbol{r}^{(p)}, \tag{1.60}$$

avec $\lambda^{(p)}$ la $p^{\text{ième}}$ valeur propre de \boldsymbol{A} et $\boldsymbol{r}^{(p)}$ le vecteur propre associé. La quantité $\widetilde{\alpha}_{i-\frac{1}{2}}^{(p)}$ est définie par

$$\widetilde{\alpha}_{i-\frac{1}{2}}^{(p)} = \alpha_{i-\frac{1}{2}}^{(p)} \phi\left(\theta_{i-\frac{1}{2}}^{(p)}\right).$$
(1.61)

La fonction ϕ correspond au limiteur de flux, qui est une fonction scalaire pour laquelle il existe plusieurs expressions :

$$\begin{cases} \phi(\theta) = \max(\theta, \min(1, \theta)) & \min(\theta) \\ \phi(\theta) = \max(0, \min(1, 2\theta), \min(2, \theta)) & \text{superbee} \\ \phi(\theta) = \max(0, \min\left(\frac{1+\theta}{2}, 2, 2\theta\right) & \text{mononized centered.} \end{cases}$$
(1.62)

L'argument fourni au limiteur de flux est le suivant :

$$\theta_{i-\frac{1}{2}}^{(p)} = \frac{\alpha_{I-\frac{1}{2}}^{(p)}}{\alpha_{i-\frac{1}{2}}^{(p)}},\tag{1.63}$$

où l'indice I est défini par

$$I = \begin{cases} i - 1 & \text{si} \quad \lambda^{(p)} > 0\\ i + 1 & \text{si} \quad \lambda^{(p)} < 0 \end{cases}$$
(1.64)

Une distinction est ici faite sur le signe des valeurs propres, qui est une manière de déterminer le sens dans lequel se propage une onde. Enfin :

$$\boldsymbol{\alpha}_{i-\frac{1}{2}} = \boldsymbol{P}^{-1} \left(\boldsymbol{U}_{i} - \boldsymbol{U}_{i-1} \right).$$
(1.65)

La quantité $\alpha_{i-\frac{1}{2}}^{(p)}$ correspond à la $p^{\text{ième}}$ composante de $\alpha_{i-\frac{1}{2}}$.

Il existe d'autres méthodes numériques, telles que la méthode de Kurganov [108–110] (dont le principe repose sur l'ajout d'informations sur les vitesses de propagation locales, et dont les performances attendues sont comparables à celles du schéma de Godunov à haute résolution), qui ne seront pas abordées dans ce manuscrit.

1.9 Conclusion du chapitre et objectifs de la thèse

Ce chapitre avait pour but de présenter un état de l'art de différents aspects de l'étude du procédé de grenaillage laser. Une description des aspects expérimentaux a premièrement été faite, afin de présenter succinctement les différents la configuration menant à une utilisation optimisée du procédé. L'objet du travail présenté dans ce manuscrit concernant la simulation du procédé de grenaillage laser, la suite de l'état de l'art a donc concerné la modélisation des matériaux utilisés (alliages métalliques), notamment leur comportement pour des très grandes vitesses de déformations. L'accent a également été mis sur les modèles de comportement cristallins, ainsi que la modélisation de microstructures polycristallines, qui seront repris dans le travail présenté dans ce manuscrit. Après une courte description de la méthode d'identification des paramètres des lois de comportement via des mesures expérimentales, des résultats de modélisation et simulation du grenaillage laser ont été présenté, d'abord au travers de résultats théoriques, puis par des simulations numériques (principalement par Éléments Finis). Ces simulations concernent majoritairement des modèles isotropes homogènes, mais un certains nombres de travaux traitent de la simulation du grenaillage laser pour des monocristaux ou polycristaux. Enfin, une dernière section a été dédiée aux méthodes numériques permettant de simuler la propagation d'une onde de contrainte.

Plusieurs pistes d'améliorations peuvent néanmoins être identifiées :

- La méthodes des Éléments Finis (et en particulier le code commercial ABAQUS) est systématiquement utilisée pour la simulation du choc laser. L'étude de ces simulations dont ce manuscrit est issu est l'occasion d'étudier d'autres méthodes numériques pour la simulation du choc laser. En particulier, les performances de ces méthodes numériques pourront être testées contre des solutions analytiques lorsque cela sera possible (pour une propagation uniaxiale élastique, ou avec un modèle de plasticité parfaitement plastique).
- 2. Le choc laser peut fournir un moyen d'identification des paramètres de lois de comportement à grande vitesse, au travers des mesures de vitesses en face arrière. Sans considérer le caractère adapté ou non d'un modèle ou d'un autre, cette méthodologie est importante, car elle permet de s'assurer que les paramètres utilisés pour les simulations correspondent au chargement et comportement qui sont modélisés. Cependant, la méthodologie actuelle d'identification nécessite la reproduction de l'essai expérimental numériquement, ce qui est une procédure complexe, et exigeante en temps de calcul. Nous chercherons à proposer dans ce manuscrit un outil numérique permettant une identification rapide des paramètres des modèles de comportement.

3. L'étude numérique du choc laser s'est faite historiquement d'un point de vue macroscopique. Comme cela a été montré dans la Section 1.7.3, les effets de la microstructure sont très peu pris en compte en simulation du LSP. Or, les contraintes résiduelles étant particulièrement sensibles à la distribution hétérogène des déformations plastiques, il est raisonnable de s'attendre à un effet de microstructure sur la distribution des contraintes résiduelles. Ceci est d'autant plus vrai pour des configurations de choc laser avec des taches laser de diamètres micrométriques, tel que pour le micro-LSP (μ LSP), où l'échelle du chargement est proche de l'échelle des grains. Un des objectifs de cette thèse sera alors d'étudier l'influence d'une microstructure polycristalline sur la propagation d'une onde de contrainte induite par un choc laser. Cette influence sera d'abord étudiée dans le cas unidimensionnel approché d'un matériau laminé (pour lequel des solutions en champ complet et homogénéisée seront comparées), puis dans le cas d'une microstructure polycristalline en deux dimensions.

1.9. CONCLUSION DU CHAPITRE ET OBJECTIFS DE LA THÈSE

Chapitre 2

Modélisation et simulation de la propagation d'une onde de contrainte dans un matériau homogène élasto-plastique

Contenu

2.1	Introduction								
2.2	Modèle 1D pour la propagation des ondes de contrainte et le champ de contraintes								
	résiduelles induit								
	2.2.1 Comportement mécanique								
	2.2.2 Propagation d'une onde de contrainte								
	2.2.3 Modélisation des contraintes résiduelles								
2.3	Simulations de vitesses en face arrière								
	2.3.1 Présentation des simulations								
	2.3.2 Résultats								
2.4	Champs résiduels induits par la propagation de l'onde de contrainte 64								
	2.4.1 Présentation des simulations								
	2.4.2 Résultats								
2.5	Discussion								
2.6	Conclusion								

2.1. INTRODUCTION

La problématique de ce manuscrit est d'étudier l'influence d'une modélisation hétérogène du matériau dans les simulations de grenaillage laser. La progression au cours des chapitres se faisant de l'échelle macroscopique à l'échelle microscopique, ce premier chapitre traitera donc de la modélisation macroscopique du choc laser. Ce dernier a plusieurs objectifs. Le premier d'entre eux sera de rappeler, à travers les différentes étapes de modélisation et résultats, les fondamentaux de la simulation du grenaillage laser. Les éléments de la littérature évoqués dans le Chapitre 1 ne seront pas repris à l'identique, car la modélisation se fera via un modèle unidimensionnel, dans le prolongement de la thèse de Ballard [18]. Ce modèle vient remplir le deuxième objectif du chapitre, qui est d'introduire des méthodes et techniques de résolution numérique, qui seront utilisées dans le reste du manuscrit. Enfin, un dernier objectif sera de montrer que le modèle présenté dans ce chapitre correspond à une bonne approximation de calculs 3D plus complexes, sous certaines hypothèses.ce modèle 1D pourra ainsi être, à l'avenir, utilisé efficacement pour l'identification du comportement macroscopique du matériau aux très grandes vitesses de déformations.

Ce chapitre est la traduction en français d'un article soumis à la revue European Journal of Mechanics. Quelques révisions sont à ce jour demandées par les reviewers.

2.1 Introduction

Le procédé de grenaillage laser est un traitement de surface visant à introduire des contraintes résiduelles de compression dans un matériau. Un faisceau laser à haute énergie $(> GW/cm^2)$ est utilisé pour impacter la surface du matériau, créant un plasma. L'expansion de ce plasma transmet l'énergie au matériau sous la forme d'une onde de pression, avec une amplitude de quelques GPa et une durée de quelques dizaines de nanosecondes, générant des déformations plastiques sur son parcours (Figure 2.1). Le profil de pression du plasma a été modélisé dans plusieurs travaux [64, 163, 171]. La relaxation du matériau crée à son tour des contraintes résiduelles de compression, dont il a été démontré qu'elles augmentent la résistance à la fatigue de l'échantillon [59, 151, 154]. Pour augmenter la quantité d'énergie transmise par le plasma dans le matériau, de l'eau est souvent utilisée comme milieu de confinement dans les montages expérimentaux [69]. En outre, l'échantillon est généralement recouvert d'un revêtement protecteur pour éviter les effets thermiques (qui pourraient entraîner des contraintes de traction à la surface). Les principales applications du grenaillage laser se situent actuellement dans les secteurs de l'aéronautique et de l'énergie [50, 132].

La modélisation et la simulation du grenaillage laser ont débuté il y a plusieurs dizaines d'années avec les travaux de Ballard [18] et Braisted [28] utilisant des modèles par éléments finis (EF). Les simulations de grenaillage laser considèrent la propagation d'une onde de contrainte dans un matériau élasto-plastique induite par une impulsion de pression dynamique. Dans la plupart des cas, le spécimen impacté est modélisé par un matériau homogène isotrope. Étant donné la gamme de pression de LSP, le comportement élastique peut incorporer une composante hydrodynamique sous la forme d'une équation d'état [152, 155]. Le comportement plastique est généralement modélisé par le modèle de Johnson-Cook [93], qui rend compte de la dépendance du comportement à la vitesse de déformation. Les simulations permettent ainsi d'étudier différents paramètres du modèle, tels que la taille du spot laser, et le recouvrement de plusieurs tirs laser [34, 179].

2.1. INTRODUCTION

Une fois que le champ de déformation plastique hétérogène a été correctement calculé dans le matériau en résolvant le problème de la propagation des ondes de contrainte, il peut être utilisé pour déterminer les contraintes résiduelles résultantes restant dans le matériau après le passage de l'onde de contrainte, en utilisant diverses méthodes. Les contraintes résiduelles étaient initialement liées analytiquement aux déformations libres (telles que les déformations plastiques), qui ne génèrent pas de contraintes par elles-mêmes mais par leur distribution hétérogène dans le matériau, conduisant à des incompatibilités de déformation, auxquelles l'échantillon réagit en générant des déformations élastiques [5, 52, 76, 92, 106]. Étant donné que ces solutions analytiques ne sont valables que pour des géométries d'échantillons spécifiques, les simulations numériques offrent un plus large éventail de possibilités. Certains travaux de la littérature [152, 153] utilisent un seul algorithme numérique explicite dynamique à la fois pour la propagation de l'onde de contrainte et la relaxation, avec une durée de simulation de plusieurs ordres de grandeur supérieurs à la durée de l'impulsion (quelques dizaines de millisecondes pour un impact unique de quelques dizaines de nanosecondes), laissant suffisamment de temps pour que l'énergie cinétique se dissipe dans le cas où des conditions aux limites de type nonréflectives sont utilisées. En revanche, plusieurs travaux [1, 2, 143, 172] utilisent une analyse numérique explicite pour la propagation de l'onde de contrainte, qui génère un champ de déformation plastique, suivie d'une étape de relaxation implicite. Brockman et al. [34] utilisent une méthodologie hybride, en utilisant des procédures explicites et implicites pour les différentes étapes de relaxation nécessaires dans leurs simulations à plans multiples. En raison du faible incrément de temps nécessaire pour que les procédures explicites produisent des résultats stables, elles sont souvent inappropriées pour les longs temps de simulation, tels que ceux requis pour les simulations de plusieurs impacts. Dans l'ensemble, l'obtention des contraintes résiduelles générées par grenaillage laser à l'aide d'une approche EF est exigeante en termes de calcul et nécessite des techniques de modélisation spécifiques.

L'objectif de cet article est de fournir un outil permettant de donner une première approximation rapide des champs mécaniques pendant l'impact et des contraintes résiduelles induites par le grenaillage laser. Pour ce faire, nous développons une modélisation 1D composée des étapes suivantes :

- 1. Une résolution numérique uniaxiale explicite de la propagation de l'onde de contrainte élastoplastique. Cette étape est nécessaire pour calculer les champs de déformation plastique induits par l'onde de contrainte.
- 2. Un calcul analytique des contraintes résiduelles basé sur le champ de déformation plastique généré à l'étape précédente, en utilisant des méthodes basées sur les déformations libres.

Pour évaluer la pertinence de cette modélisation 1D pour des cas réels de choc, nous la comparons à un modèle 3D EF axisymétrique de référence. Bien que cette approche 1D ne puisse pas modéliser certaines caractéristiques des champs axisymétriques, nous montrons qu'une grande partie de la zone impactée peut être approximée par un champ uniaxial. Nous donnons des exemples numériques pour divers matériaux ayant un comportement dépendant de la vitesse de déformation. L'approximation proposée peut être utile pour fournir un premier aperçu des contraintes résiduelles induites sur un matériau donné, ou comme outil puissant d'identification permettant de déterminer les paramètres de la loi de comportement du matériau. L'outil numérique, qui est mis à disposition (sous licence LGPL), donne des résultats en très bon accord avec les modèles EF, mais de manière bien plus rapide et simple à utiliser.

Le chapitre est organisé comme suit. Dans la Section 2.2, nous présenterons le cadre mécanique, écrirons les équations de propagation des ondes de contrainte pour un comportement élasto-plastique avec un comportement dépendant de la vitesse de déformation, et détaillerons la méthode numérique utilisée pour les simulations. Le champ de déformation plastique obtenu est ensuite utilisé pour les calculs analytiques de contraintes résiduelles basés sur les méthodes des déformations libres. Ensuite, dans la Section 2.3, nous effectuons des tests numériques sur divers matériaux, pour évaluer l'étape de propagation de notre modèle en étudiant les profils de vitesse de la face arrière et en les comparant à une solution de référence EF. Enfin, dans la Section 2.4, nous appliquons la même méthodologie pour évaluer la distribution des champs résiduels induits par la propagation des ondes de contrainte, par comparaison avec une solution EF de référence. L'outil numérique développé ici, nommé EVEREST, est mis à disposition sous licence LGPL.

2.2 Modèle 1D pour la propagation des ondes de contrainte et le champ de contraintes résiduelles induit

L'objectif de cette section est de présenter un modèle 1D pour les contraintes résiduelles causées par la propagation d'une onde de contrainte élasto-plastique induite par un choc laser. Un tel modèle ne peut pas remplacer des modèles 3D plus complexes et précis, mais peut être utilisé comme une modélisation initiale du problème.

2.2.1 Comportement mécanique

Dans ce travail, nous considérons un matériau homogène isotrope avec un comportement élastoplastique décrit par les équations suivantes (en l'absence de forces volumiques) :

	$\int \operatorname{div}\left(\boldsymbol{\sigma}\right) = \rho \frac{\partial^2 \boldsymbol{u}}{\partial t^2}$	Equilibre dynamique	
	$oldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}: oldsymbol{arepsilon}_e = \mathbb{C}: (oldsymbol{arepsilon} - oldsymbol{arepsilon}_p)$	Loi de Hooke	
	$oldsymbol{arepsilon} oldsymbol{arepsilon} \left(oldsymbol{u} ight) = rac{1}{2}\left(ablaoldsymbol{u}+ abla^Toldsymbol{u} ight)$	Relation déformation - déplacement	(2,1)
١	$g = \sigma_{\rm eq} - R \le 0$	Critère de plasticité	(2.1)
	$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p = \dot{\lambda} \frac{\partial g}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \\ \dot{\lambda} \ge 0 \\ \dot{\lambda}g = 0, \end{cases}$	Règle de normalité et condition de consistence	

où σ est le tenseur des contraintes, ε le tenseur des déformations totales, ε_e le tenseur des déformations élastiques, ε_p le tenseur des déformations plastiques et u le champ de déplacement. La quantité ρ est la masse volumique du matériau, et \mathbb{C} est le tenseur de rigidité d'ordre quatre, donné par

$$\mathbb{C} = 3\kappa \mathbb{J} + 2\mu \mathbb{K},\tag{2.2}$$

où κ et μ sont respectivement les modules de compressibilité et de cisaillement. On suppose que \mathbb{C} est isotrope, bien que les développements puissent être facilement étendus aux matériaux anisotropes. Les tenseurs d'ordre 4 \mathbb{J} et \mathbb{K} sont donnés par

$$\mathbb{J} = \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \quad \text{et} \quad \mathbb{K} = \mathbb{I} - \mathbb{J},$$
(2.3)

I étant le tenseur d'identité du second ordre, et \mathbb{I} le tenseur d'identité d'ordre 4. Dans le critère de plasticité, R est la limite d'élasticité et σ_{eq} est la contrainte équivalente de von Mises définie par

$$\sigma_{\rm eq} = \sqrt{\frac{3}{2}\boldsymbol{\sigma}_d : \boldsymbol{\sigma}_d}, \quad \boldsymbol{\sigma}_d = \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{3}\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma})\boldsymbol{I}, \tag{2.4}$$

où σ_d est la partie déviatorique du tenseur des contraintes. Enfin, λ désigne le multiplicateur plastique.

Le grenaillage laser est caractérisé par des vitesses de déformation très élevées (~ 10^6 s⁻¹). Il est essentiel de tenir compte de la dépendance du comportement du matériau à la vitesse de déformation. Par conséquent, un modèle de plasticité adapté doit être utilisé. De plus, pour nos applications, nous négligerons les variations de la température, car il a été montré dans plusieurs travaux qu'elles n'avaient pas d'impact significatif [86, 115], la variation de température restant faible. Le modèle couramment utilisé dans la littérature [8, 44, 96, 152, 153] est le modèle de plasticité de Johnson-Cook [93], pour lequel la limite d'élasticité R est donnée par (sans influence de la température) :

$$R(p,\dot{p}) = (A + Bp^n) \left(1 + C \ln \left(\frac{\dot{p}}{\dot{\varepsilon}_0} \right) \right), \qquad (2.5)$$

où \dot{p} est la vitesse de déformation équivalente (au sens de von Mises) et p est la déformation plastique cumulée définie par

$$\dot{p} = \sqrt{\frac{2}{3}} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p, \quad p = \int_0^t \dot{p}(\tau) \mathrm{d}\tau.$$
(2.6)

Pour ce modèle, on peut montrer que $\dot{\lambda} = \dot{p}$. Dans l'Equation (2.5), A, B, C, n et $\dot{\varepsilon}_0$ sont des paramètres à déterminer. Pour nos applications, nous ne considérerons pas d'écrouissage cinématique. L'écrouissage cinématique est nécessaire lorsque le chargement a une nature cyclique, comme dans le cas d'impacts répétés, une situation que nous ne considérerons pas dans ce manuscrit. Ces développements sont laissés pour des travaux ultérieurs.

Il convient de noter que le comportement élastique du matériau est décrit par la loi de Hooke, au lieu d'une équation d'état, comme cela est généralement fait pour les simulations de grenaillage laser [152, 153, 172]. Une équation d'état est nécessaire pour décrire le comportement hydrodynamique d'un matériau lorsqu'il est soumis à un chargement de choc avec une pression et une vitesse de déformation élevées. Néanmoins, dans le contexte de ce travail (c'est-à-dire la détermination du champ de contraintes résiduelles), l'équation d'état peut être négligée car, comme le montre Chaieb [44], elle a peu d'effet sur le champ de contraintes résiduelles généré par la propagation des ondes de contrainte. De plus, selon Ballard [18], le comportement hydrodynamique d'un matériau peut être négligé si la pression appliquée est inférieure à 0.1κ , qui est de l'ordre d'une dizaine de GPa pour nos applications. Nous vérifierons que cette condition est ici respectée.

Les Equations (2.1) à (2.6) peuvent être utilisées pour décrire la propagation d'une onde de contrainte élasto-plastique. Ce problème peut être séparé en deux étapes de calcul consécutives, la première calculant la propagation d'une onde élastique, la seconde appliquant une correction plastique si nécessaire.

2.2.2 Propagation d'une onde de contrainte

2.2.2.1 Equation de propagation d'une onde de contrainte dans une configuration axisymétrique



FIGURE 2.1 – Illustration du procédé de grenaillage laser.

Nous écrivons ici l'expression des équations gouvernant la propagation des ondes de contrainte, en suivant la méthodologie de [18, 84] (voir aussi [15, 112]). Dans ce but, nous adoptons l'hypothèse des petits déplacements, et considérerons une tache laser circulaire. Les champs de contraintes et de déformations qui sont solution du problème sont donc axisymétriques. Par la suite, nous limitons l'analyse le long de l'axe de symétrie, désigné par e_1 dans la Figure 2.1. Par conséquent, le déplacement et le champ de déformation total sont uniaxiaux et de la forme suivante :

$$\boldsymbol{u}(x,t) = u_1(x,t)\boldsymbol{e}_1 \quad \text{and} \quad \boldsymbol{\varepsilon}(x,t) = \varepsilon_{11}(x,t)\boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_1,$$
 (2.7)

avec $\varepsilon_{11} = \partial u_1 / \partial x$, x étant la coordonnée dans la direction e_1 . Cette situation correspond aussi à une tache laser de rayon infini. De plus, le champ de déformation plastique (isochore) est de la forme

$$\boldsymbol{\varepsilon}_p(x,t) = \boldsymbol{\varepsilon}_p(x,t) \left(\boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_1 - \frac{1}{2} \left(\boldsymbol{e}_2 \otimes \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3 \otimes \boldsymbol{e}_3 \right) \right).$$
(2.8)

En utilisant les Equations $(2.1)_1$, (2.7) et (2.8), il s'ensuit que le champ de contrainte est de la forme suivante :

$$\boldsymbol{\sigma}(x,t) = \sigma_{11}(x,t)\boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_1 + \sigma_{22}(x,t) \left(\boldsymbol{e}_2 \otimes \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3 \otimes \boldsymbol{e}_3\right), \qquad (2.9)$$

avec

$$\begin{cases} \sigma_{11}(x,t) = \left(\kappa + \frac{4}{3}\mu\right)\varepsilon_{11}(x,t) - 2\mu\varepsilon_p(x,t) \\ \sigma_{22}(x,t) = \left(\kappa - \frac{2}{3}\mu\right)\varepsilon_{11}(x,t) + \mu\varepsilon_p(x,t). \end{cases}$$
(2.10)

Il s'ensuit, à partir de l'équilibre dynamique et de la loi de Hooke dans l'Equation (2.1), que les

équations de propagation des ondes se réduisent à

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x}(x,t) = \rho \frac{\partial v_1}{\partial t}(x,t) \\ \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial t}(x,t) = \left(\kappa + \frac{4}{3}\mu\right) \frac{\partial \varepsilon_{11}}{\partial t}(x,t) - 2\mu \frac{\partial \varepsilon_p}{\partial t}(x,t), \end{cases}$$
(2.11)

où $v_1 = \partial u_1 / \partial t$ est la vitesse matérielle dans la direction de l'impact. En utilisant la relation

$$\frac{\partial \varepsilon_{11}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_1}{\partial t} \right) = \frac{\partial v_1}{\partial x}, \tag{2.12}$$

le système de l'Equation (2.11) devient ainsi :

$$\begin{cases}
\frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x}(x,t) = \rho \frac{\partial v_1}{\partial t}(x,t) \\
\frac{\partial \sigma_{11}}{\partial t}(x,t) = \left(\kappa + \frac{4}{3}\mu\right) \frac{\partial v_1}{\partial x}(x,t) - 2\mu \frac{\partial \varepsilon_p}{\partial t}(x,t).
\end{cases}$$
(2.13)

Le système (2.13) est utilisé pour modéliser la propagation des ondes de contrainte élastique-plastique, dont nous allons maintenant détailler la résolution.

2.2.2.2 Propagation élastique

La première étape pour résoudre le système (2.13) consiste à calculer le prédicteur élastique, en supposant (momentanément) que l'incrément de déformation plastique est nul ($\partial \varepsilon_p / \partial t = 0$). Dans ce cas, l'Equation (2.13) peut être écrite sous la forme matricielle suivante :

$$\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t} + \boldsymbol{A} \frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial x} = 0, \qquad (2.14)$$

avec

$$\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ v_1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 0 & -\left(\kappa + \frac{4}{3}\mu\right) \\ -\frac{1}{\rho} & 0 \end{pmatrix}.$$
(2.15)

L'Equation (2.14), appelée équation d'advection, est un système hyperbolique d'équations aux dérivées partielles (EDP). En tant que telle, elle peut être résolue numériquement par une grande variété d'algorithmes explicites dédiés basés sur l'approche des volumes finis [119].

Nous subdivisons le domaine temporel et spatial de notre problème et introduisons les incréments spatiaux et temporels Δx et Δt , ainsi que les notations $(.)_i$ et $(.)^k$ correspondant respectivement à une cellule spatiale et un incrément temporel donnés. Ainsi $x_i = x_{i-1} + \Delta x$, $t^k = t^{k-1} + \Delta t$, et $u(x_i, t^k) = u_i^k$, avec $1 \le i \le N$, N étant le nombre de nœuds. Les méthodes numériques considérées pour ce problème sont explicites, et doivent respecter la condition dite de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) :

$$CFL = c \frac{\Delta t}{\Delta x} \le 1, \tag{2.16}$$

où c est la vitesse maximale de ondes de contraintes de traction/compression. Elle est définie par :

$$c = \sqrt{\frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial \varepsilon_{11}}},\tag{2.17}$$

qui devient, dans le cas d'un matériau élastique isotrope :

$$c = \sqrt{\left(\kappa + \frac{4}{3}\mu\right)/\rho}.$$
(2.18)

Il est intéressant de noter que dans le cas d'une évolution élasto-plastique, la valeur maximale de la vitesse c est atteinte lors de la propagation élastique puisque le module tangent est plus faible dans le domaine plastique. Par conséquent, la valeur considérée dans tous les cas pour c est celle donnée par l'Equation (2.18). En pratique, la condition CFL (2.16) est utilisée pour calculer la valeur maximale de l'incrément temporel Δt , pour une discrétisation spatiale (Δx), des propriétés matériaux élastiques (κ , μ et ρ) et une valeur du nombre CFL données (fixe au cours de la simulation).

Nous considérons un algorithme de type Godunov [118, 119] qui combine simplicité et précision puisqu'il permet d'éviter les effets numériques parasites tels que les oscillations et l'amortissement [112]. L'analyse des performances des divers algorithmes est étudiée dans l'Annexe A. Nous désignons par U_i^k le vecteur des inconnues à l'incrément temporel k et à la cellule spatiale i. La résolution numérique de l'Equation (2.14) se fait en calculant U_i^{k+1} avec

$$\boldsymbol{U}_{i}^{k+1} = \boldsymbol{U}_{i}^{k} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\boldsymbol{F}_{i+1/2}^{k} - \boldsymbol{F}_{i-1/2}^{k} \right).$$
(2.19)

Dans l'Equation (2.19), les quantités $F_{i+1/2}^k$ et $F_{i-1/2}^k$ sont données par :

$$\boldsymbol{F}_{i+1/2}^{k} = \boldsymbol{A}^{+} \boldsymbol{U}_{i}^{k} + \boldsymbol{A}^{-} \boldsymbol{U}_{i+1}^{k}, \quad \boldsymbol{F}_{i-1/2}^{k} = \boldsymbol{A}^{+} \boldsymbol{U}_{i-1}^{k} + \boldsymbol{A}^{-} \boldsymbol{U}_{i}^{k}, \quad (2.20)$$

où A^+ et A^- sont des matrices définies par

$$\boldsymbol{A}^{+} = \boldsymbol{P} \begin{pmatrix} c & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \boldsymbol{P}^{-1} \quad \boldsymbol{A}^{-} = \boldsymbol{P} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -c \end{pmatrix} \boldsymbol{P}^{-1}, \qquad (2.21)$$

avec P étant la matrice composées des vecteurs propres de A, ayant pour expression ici :

$$\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} -\sqrt{\rho\left(\kappa + \frac{4}{3}\mu\right)} & \sqrt{\rho\left(\kappa + \frac{4}{3}\mu\right)} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$
(2.22)

Avec cette méthode numérique, l'inconnue U_i^{k+1} est obtenue par combinaison linéaire des quantités connues U_{i-1}^k , U_i^k et U_{i+1}^k à l'incrément temporel précédent. Afin de réousdre ce problème de manière efficace, l'Equation (2.19) est écrite de la manière suivante :

$$\boldsymbol{X}^{k+1} = \boldsymbol{D}\boldsymbol{X}^k, \tag{2.23}$$

avec $\mathbf{X}^k = \left(\mathbf{U}_1^k \ \mathbf{U}_2^k \ \dots \ \mathbf{U}_N^k\right)^T$ et \mathbf{D} étant une matrice construite à partir de \mathbf{A}^+ et \mathbf{A}^- . Il convient de noter que plusieurs améliorations de la méthode de Godunov, basées sur des limiteurs de flux non linéaires, permettent d'améliorer la qualité du champ de solution en présence de solutions discontinues [84, 119]. Néanmoins, étant donné que les applications numériques de cet article ne considèrent que des matériaux homogènes et des chargements continus, les limiteurs de flux non linéaires ne sont pas considérés et l'Equation (2.23) est utilisée. Cette étape de propagation élastique est utilisée pour calculer au temps t^{k+1} la vitesse du matériau v_1 et la composante de contrainte σ_{11} , en supposant que le taux de déformation plastique est nul. Il est intéressant de noter que, puisque la déformation plastique n'apparaît pas dans l'équation d'évolution de la vitesse du matériau v_1 (voir Equation (2.13)₁), le calcul de v_1 restera valable en présence d'une déformation plastique. Le champ de contraintes obtenu est appelé prédicteur élastique et sera identifié par l'indice (·)_{trial}.

2.2.2.3 Correction plastique

Après le calcul du champ de contraintes considérant une propagation élastique, il faut vérifier si le prédicteur élastique est plastiquement admissible. Si la condition $g(\boldsymbol{\sigma}_{\text{trial}}^{k+1}, R^k) \leq 0$ est satisfaite, alors l'évolution est purement élastique et l'état mécanique final est simplement donné par

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma}^{k+1} &= \boldsymbol{\sigma}^{k+1}_{\text{trial}} \\ \boldsymbol{\varepsilon}^{k+1}_p &= \boldsymbol{\varepsilon}^k_p, \end{cases}$$
(2.24)

où la composante de contrainte $(\sigma_{22}^{k+1})_{\text{trial}}$ est obtenue en utilisant l'Equation (2.10) :

$$(\sigma_{22}^{k+1})_{\text{trial}} = \sigma_{22}^k + \frac{3\kappa - 2\mu}{3\kappa + 4\mu} \left((\sigma_{11}^{k+1})_{\text{trial}} - \sigma_{11}^k \right).$$
(2.25)

Cependant, si $g(\boldsymbol{\sigma}_{\text{trial}}^{k+1}, R^k) > 0$, alors le prédicteur élastique n'est pas plastiquement admissible et une correction plastique est nécessaire en utilisant un algorithme de retour radial [128, 176] (pour une description détaillée voir [26]) pour s'assurer que le critère de plasticité est vérifié. Dans ce cas, l'incrément de la déformation plastique doit être calculé en utilisant la règle de normalité et la condition de consistance. En raison de la non-linéarité du modèle de Johnson-Cook dans l'Equation (2.5), il n'existe pas de solution explicite à ce problème, ce qui le rend semi-analytique. La contrainte finale peut être écrite comme

$$\boldsymbol{\sigma}^{k+1} = \boldsymbol{\sigma}^{k+1}_{\text{trial}} - (3\kappa \mathbb{J} + 2\mu \mathbb{K}) : \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^k_p, \qquad (2.26)$$

où $\Delta \varepsilon_p^k$ est l'incrément de déformation plastique, donné par :

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{p}^{k} = \Delta p^{k} \frac{3}{2} \frac{\boldsymbol{\sigma}_{d}^{k+1}}{\boldsymbol{\sigma}_{\text{eq}}^{k+1}}.$$
(2.27)

Dans l'Equation (2.27), Δp^k est l'incrément de déformation plastique équivalente, qui constitue l'inconnue du problème de projection. En utilisant l'Equation (2.27), la contrainte finale est la suivante

$$\boldsymbol{\sigma}^{k+1} = \boldsymbol{\sigma}_{\text{trial}}^{k+1} - 3\mu\Delta p^k \frac{\boldsymbol{\sigma}_d^{k+1}}{\boldsymbol{\sigma}_{\text{eq}}^{k+1}}.$$
(2.28)

En prenant la norme de von Mises de la contrainte σ^{k+1} , nous obtenons

$$\sigma_{\rm eq}^{k+1} = \sigma_{\rm trial, eq}^{k+1} - 3\mu\Delta p^k.$$
(2.29)

Le critère de plasticité $g(\pmb{\sigma}^{k+1},R^{k+1})=0$ doit être vérifié, ce qui conduit à :

$$\sigma_{\text{trial,eq}}^{k+1} - 3\mu\Delta p^k - R(p^{k+1}, \dot{p}^{k+1}) = 0, \qquad (2.30)$$

où p^{k+1} et \dot{p}^{k+1} sont donnés par :

$$p^{k+1} = p^k + \Delta p^k, \quad \dot{p}^{k+1} = \frac{\Delta p^k}{\Delta t}.$$
 (2.31)

L'Equation (2.30) est une équation non linéaire dont la seule inconnue est Δp^k et qui peut être résolue par une méthode de Newton. Une fois que Δp^k est connu, la contrainte finale peut être déduite en combinant les équations (2.28) et (2.29) :

$$\boldsymbol{\sigma}^{k+1} = \frac{1}{3} \operatorname{Tr}(\boldsymbol{\sigma}_{\text{trial}}^{k+1}) \boldsymbol{I} + \boldsymbol{\sigma}_{\text{trial},d}^{k+1} \left(1 - \frac{3\mu\Delta p^k}{\sigma_{\text{trial},\text{eq}}^{k+1}} \right).$$
(2.32)

 σ^{k+1} peut maintenant être utilisé pour calculer $\varepsilon_p^{k+1} = \varepsilon_p^k + \Delta \varepsilon_p^k$ avec l'Equation (2.27). La correction plastique est détaillée dans l'algorithme en pseudo-code suivant :

Algorithm Correction plastique

Variables d'entrée : σ_{11}^k , σ_{22}^k , ε_{11}^k , $\varepsilon_{p,11}^k$, p^k , R^k . Calculer σ_{11}^{trial} , v_1^{k+1} avec la méthode numérique en supposant une propagation élastique avec l'Equation (2.23). Calculer la valeur de σ_{22}^{trial} correspondante avec l'Equation (2.25). Prédicteur élastique : $\varepsilon_{p,11}^{k+1} = \varepsilon_{p,11}^k$ et $p^{k+1} = p^k$ if $J_2(\sigma^{trial}) - R^k \leq 0$ then $\sigma^{k+1} = \sigma^{trial}$ else Trouver Δp tel que $\sigma_{eq,trial}^{k+1} - 3\mu\Delta p - R(p^{k+1}, \dot{p}^{k+1}) = 0$ Calculer $\sigma^{k+1} = \frac{1}{3} \text{Tr}(\sigma_{trial}^{k+1})I + \sigma_{trial,d}^{k+1} \left(1 - \frac{3\mu\Delta p^k}{\sigma_{trial,eq}^{k+1}}\right)$ Calculer $\Delta \varepsilon_p = \frac{3}{2} \frac{\sigma_d^{k+1}}{\sigma_{trial}^{trial}} \Delta p$ Calculer ε_p^{k+1} et p^{k+1} en utilisant $\Delta \varepsilon_p$ et Δp . Calculer $R^{k+1} = R(p^{k+1}, \dot{p}^{k+1})$

End

2.2.3 Modélisation des contraintes résiduelles

La résolution de la propagation de l'onde de choc permet de déterminer l'évolution de la déformation plastique résiduelle. Cependant, les contraintes résiduelles résultent du fait que le matériau atteint un équilibre statique. En d'autres termes, le champ de contraintes résiduelles doit être déterminé une fois que l'onde ne se propage plus dans l'échantillon. Il est donc nécessaire de recourir à une autre procédure pour le déterminer. Dans ce but, le champ de contraintes résiduelles peut être calculé par des méthodes analytiques, comme présenté dans le cas des déformations thermiques par Johns [92]. Ahdad and Desvignes [5] ont appliqué une méthode similaire aux déformations plastiques pour diverses géométries (voir également [5, 43, 52, 76, 106]). Ces méthodes sont basées sur le calcul de l'équilibre des contraintes dû à la présence de déformations permanentes internes incompatibles (appelées déformations libres) qui peuvent être induites par une déformation inélastique hétérogène,

des gradients de température ou des transformations de phase. La nature analytique de ces méthodes permet un calcul rapide des contraintes résiduelles.

Ainsi, le champ de déformation plastique, généré par la propagation de l'onde de choc présentée dans la Section 2.2, sera utilisé comme déformation libre initiale et le champ de contraintes résiduelles associé sera déterminé à partir de celle-ci. En pratique, le champ de contraintes résiduelles dépend également de l'épaisseur de l'éprouvette, et plus généralement de sa géométrie.

Nous supposons ici que l'échantillon est une plaque infinie sans chargement externe, d'une épaisseur finie e, avec des déformations plastiques variables selon la direction e_1 , comme illustré sur la Figure 2.2. Dans cette configuration, la plaque est laissée libre de contrainte et est libre de fléchir en raison de l'équilibre statique.



FIGURE 2.2 – Illustration de l'échantillon infiniment plan.

La notation h correspond à la profondeur jusqu'à laquelle le grenaillage laser génère une déformation plastique, c'est-à-dire que $\varepsilon_p(x) = 0$ pour $x \ge h$ et donc $\int_h^e \varepsilon_p(x) dx = 0$. En raison de l'axisymétrie du choc laser considéré dans la Section 2.2, le champ de déformation plastique résultant obtenu dans l'étape de propagation des ondes de contrainte est axisymétrique, voir Equation (2.8). Nous supposons que ce champ de déformation plastique est uniforme et infini dans les directions e_2 et e_3 , et ne dépend donc que de x. Le tenseur des déformations totales est également axisymétrique :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \varepsilon_{11}(x)\boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_1 + \varepsilon_{22}(x)\left(\boldsymbol{e}_2 \otimes \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3 \otimes \boldsymbol{e}_3\right).$$
(2.33)

Suivant Korsunsky [106] (voir aussi Gelineau [76] qui a étudié ce problème dans un cas plus général), la résolution des équations de compatibilité implique que les déformations radiales dans la plaque courbée sont de la forme suivante :

$$\varepsilon_{22}(x) = \varepsilon_{33}(x) = \alpha x + \beta, \qquad (2.34)$$

où α et β sont des constantes à déterminer. Ce résultat, issu de la résolution des équations de compatibilité, a également été utilisé dans Cellard et al. [43] pour calculer les déformations plastiques à partir des contraintes résiduelles mesurées. Ensuite, puisque la plaque est infinie dans les directions e_2 et e_3 et que la contrainte axiale σ_{11} est nulle à la surface, l'état de contrainte est plan, de sorte que nous avons

$$\sigma_{11}(x) = 0, \quad \forall x. \tag{2.35}$$

Cela implique que

$$\varepsilon_{11}(x) = -2\frac{3\kappa - 2\mu}{3\kappa + 4\mu}\varepsilon_{22}(x) + \frac{6\mu}{3\kappa + 4\mu}\varepsilon_p(x).$$
(2.36)

En utilisant les Equations (2.36), (2.34) et $(2.1)_2$, nous obtenons :

$$\sigma_{22}(x) = \sigma_{33}(x) = \frac{18\kappa\mu}{3\kappa + 4\mu} \left(\alpha x + \beta + \frac{\varepsilon_p(x)}{2}\right).$$
(2.37)

Les constantes α et β sont déterminées en imposant l'absence de chargement, de sorte que les forces normales et le moment de flexion soient à l'équilibre. Ce qui conduit à :

$$\begin{cases} \int_{0}^{e} \sigma_{22}(x) dx = 0\\ \int_{0}^{e} \sigma_{22}(x) x dx = 0, \end{cases}$$
(2.38)

et de manière similaire pour $\sigma_{33}(x)$, non présenté ici. L'Equation (2.38) mène au système suivant

$$\begin{cases} 9e\left(\alpha\frac{e}{2}+\beta\right)+\int_{0}^{h}\varepsilon_{p}(x)\mathrm{d}x=0\\ 9e^{2}\left(\alpha\frac{e}{3}+\frac{\beta}{2}\right)+\int_{0}^{h}\varepsilon_{p}(x)x\mathrm{d}x=0, \end{cases}$$
(2.39)

où la quantité $\varepsilon_p(x)$ est intégrée seulement jusqu'à h puisque $\int_h^e \varepsilon_p(x) dx = 0$. En utilisant les notations suivantes

$$\Gamma_1 = \int_0^h \varepsilon_p(x) dx$$
 and $\Gamma_2 = \int_0^h \varepsilon_p(x) x dx$, (2.40)

la résolution du système (2.38) mène à

$$\begin{cases} \alpha = \frac{12}{e^3} \left(\Gamma_2 - \frac{e\Gamma_1}{2} \right) \\ \beta = \frac{2}{e} \left(2\Gamma_1 - \frac{3\Gamma_2}{e} \right), \end{cases}$$
(2.41)

 et

$$\sigma_{22}(x) = \sigma_{33}(x) = \frac{18\kappa\mu}{3\kappa + 4\mu} \left(\frac{2\Gamma_1}{e^2} \left(2e - 3x\right) + \frac{6\Gamma_2}{e^3} \left(2x - e\right) + \frac{\varepsilon_p(x)}{2}\right).$$
(2.42)

Notamment, le rayon de courbure de la plaque dû à la flexion est donné par $\Omega = e/[6(2\Gamma_2 - \Gamma_1)]$ (voir par exemple Korsunsky [106]).

Il est intéressant de noter que pour les très grandes épaisseurs, c'est-à-dire lorsque e tend vers l'infini, les coefficients α et β de l'Equation (2.41) tendent vers zéro. Nous avons donc $\varepsilon_{22}(x) = 0$ et nous obtenons le résultat classique [5] :

$$\sigma_{22}(x) = \sigma_{33}(x) = \frac{18\kappa\mu}{3\kappa + 4\mu} \frac{\varepsilon_p(x)}{2}.$$
(2.43)

2.3 Simulations de vitesses en face arrière

2.3.1 Présentation des simulations

Le but de cette section est d'étudier la validité du modèle développé dans la Section 2.2 à travers plusieurs applications numériques. Ces résultats numériques seront notamment comparés aux résultats EF 3D de référence, afin d'évaluer la capacité de notre modèle à calculer correctement les champs mécaniques, dans le cas de différents paramètres matériau et diamètres du spot laser pour le modèle EF. Nous commençons par une section consacrée à la vitesse de la face arrière, qui est une quantité d'intérêt, car elle peut être mesurée expérimentalement [152]. La simulation de la vitesse de la face arrière ne nécessite que l'étape de propagation (voir Section 2.2.1). La comparaison avec un modèle EF 3D nous permettra également d'étudier dans quelle mesure le modèle 1D approxime correctement les champs 3D.

Paramètres matériau Afin d'étudier les performances du modèle 1D, différents matériaux seront testés. Nous considérerons quatre matériaux dont les comportements dépendent de la vitesse de déformation : un acier 12Cr, un alliage d'acier inoxydable, un alliage de titane et un alliage d'aluminium. Les paramètres matériaux sont donnés dans le Tableau 2.1, où E désigne le module d'Young, et ν le coefficient de Poisson.

TABLE 2.1 – Paramètres matériaux pour les simulations selon les références précisées.

	$\rho (\mathrm{kg.m^{-3}})$	E (GPa)	ν	κ (GPa)	μ (GPa)	A (MPa)	B (MPa)	n	C	$\dot{\varepsilon}_0 (\mathrm{s}^{-1})$
12Cr Steel [153]	7800	210	0.3	175	80.8	870	400	0.4	0.015	0.01
316L [186]	7800	210	0.3	175	80.8	305	441	0.1	0.057	1
Ti-6Al-4V [124]	4500	116	0.34	120.8	43.3	862.5	331.2	0.34	0.012	1
Al7075-T6 [200]	2700	69	0.33	67.6	25.9	473	210	0.3813	0.033	0.01

Description du chargement Le chargement appliqué est typique d'une application d'impact laser. Nous utilisons une description temporelle et spatiale (adaptée de [115]) de la pression appliquée sur la surface supérieure de l'échantillon, représentée dans la Figure 2.3.



FIGURE 2.3 – Modélisation du chargement du laser adapté de [115] : (a) profil temporel de pression normalisée, (b) distribution spatiale de pression normalisée pour plusieurs diamètres de spot.

La Figure 2.3(b) présente plusieurs distributions spatiales, correspondant à différents diamètres de spot. Les valeurs choisies pour ces diamètres sont proches des valeurs utilisés dans les conditions expérimentales, et seront utilisées dans le modèle EF 3D.

Pour les modèles 1D et 3D, nous considérons une épaisseur d'échantillon de e = 0.5 mm pour reproduire les conditions expérimentales usuelles, une amplitude de pression de P = 5 GPa afin d'observer correctement les effets plastiques dans les résultats de vitesse de la face arrière, et une durée totale de simulation de 400 ns.

Description du modèle 1D Pour la modélisation 1D, nous imposons $\Delta x = 2 \ \mu m$ pour l'incrément spatial, qui est une valeur pour laquelle la convergence est atteinte, et une valeur CFL de 0.9, conduisant à des valeurs de Δt d'environ 0.3 ns. Les conditions aux limites sont :

$$\sigma_{11}(0,t) = P(t) \text{ and } \sigma_{11}(e,t) = 0,$$
 (2.44)

où P(t) fait référence au profil temporel de pression (voir Figure 2.3(a)). Selon Ballard [18], le comportement hydrodynamique de l'éprouvette peut être négligé lorsque la valeur maximale de la pression est inférieure à 0.1κ , ce qui est le cas pour tous les matériaux du tableau 2.1. Dans ce cas, l'approximation des petites déformations est valide. De plus, les conditions initiales sont :

$$\begin{cases} \sigma_{11}(x,0) = 0 \\ v_1(x,0) = 0 \end{cases} \quad \text{for} \quad 0 \le x \le e.$$
(2.45)

Description du modèle Elements Finis Pour la modélisation par éléments finis, nous suivons la stratégie de Seddik et al. [172], et utilisons un modèle axisymétrique avec le code commercial ABAQUS. Le modèle est illustré dans la Figure 2.4.



FIGURE 2.4 – Illustration du modèle EF utilisé pour le simulations de vitesse en face arrière.

Nous choisissons L = 7 mm, ce qui est suffisamment grand pour ne pas influencer les résultats. Cette géométrie est choisie afin de reproduire les conditions expérimentales. La distribution spatiale de la pression appliquée suit les profils de la Figure 2.3(b) pour les différents diamètres de tache laser d, qui sont repris et adaptés de Le Bras et al. [115]. Des éléments CAX4R de dimensions $2 \times 2 \mu m$ sont utilisés. Les résultats sont obtenus avec une durée de simulation dans ABAQUS/Explicit de 400 ns, ce qui est suffisamment long pour que l'onde axiale fasse plusieurs allers-retours. Toujours dans le but de reproduire le montage expérimental, une condition limite unique d'encastrement est appliquée au point A de la Figure 2.4. La vitesse de la face arrière correspond à la vitesse axiale prise au point O.

2.3.2 Résultats

Nous présentons les résultats de la vitesse en face arrière dans la Figure 2.5 pour les quatre matériaux du Tableau 2.1.



FIGURE 2.5 – Comparaison des simulations de la vitesse en face arrière entre le modèle 1D et la solution de référence EF 3D pour les différents matériaux et trois tailles de tache laser. (a) 12Cr, (b) 316L, (c) Ti-6Al-4V et (d) Al7075-T6.

Les résultats de la Figure 2.5 montrent l'évolution de la vitesse en face arrière du point O dans la Figure 2.4. Seuls les résultats pour les diamètres d = 1 mm, d = 3 mm et d = 5 mm ont été présentés par soucis de clarté. Les résultats pour les diamètres d = 2 mm et d = 4 mm sont intermédiaires à leurs diamètres adjacents respectifs. Chaque pic « principal » de la Figure 2.5 représente l'onde axiale réfléchie sur la face arrière. Le temps séparant les grands pics correspond au temps nécessaire à l'onde pour faire un aller-retour dans l'échantillon depuis la face arrière. La Figure 2.5 montre que pour tous les matériaux, plus la taille de la tache est grande, plus le modèle 1D est en accord avec le comportement du modèle 3D. Une excellente correspondance est obtenue pendant environ 120 ns pour d = 1 mm, et jusqu'à 350 ns pour d = 5 mm. Pour tous les matériaux, le premier pic présente un léger changement de courbe à environ 100 ns appelé précurseur élastique, qui correspond à la plus petite valeur de vitesse au-dessus de laquelle l'onde induit des déformations plastiques dans le matériau. Ce précurseur est causé par un changement de la vitesse de l'onde, qui est plus élevée lorsque l'onde de contrainte est élastique que lorsqu'elle est plastique. Pour tous les matériaux et toutes les tailles de points, au bout d'un certain temps, des effets de bord commencent à apparaître, provoquant ainsi des écarts entre les simulations 1D et 3D. Ces effets de bord sont dus à des ondes provenant des bords de la tache laser et se propageant vers l'intérieur. Cette perturbation arrive donc plus rapidement au centre pour les petites tailles de spot. Ces perturbations dépendent donc principalement de la taille

2.4. CHAMPS RÉSIDUELS INDUITS PAR LA PROPAGATION DE L'ONDE DE CONTRAINTE

du spot mais aussi de l'épaisseur de la plaque et du matériau. Dans l'ensemble, le modèle simplifié 1D proposé convient pour décrire la propagation des ondes de contraintes élastiques-plastiques en dehors des effets de bord, et donne d'excellents résultats pour les grandes taches. Un temps critique approximatif au-delà duquel des différences entre les résultats des modèles 1D et 3D sont attendues peut être exprimé comme suit :

$$t_c = \frac{d}{2} \sqrt{\frac{3\rho}{3\kappa + 4\mu}},\tag{2.46}$$

qui correspond au temps que met une onde de compression/traction pour se déplacer des bords du spot laser jusqu'au centre de l'impact à la surface. Ainsi, pour une taille de spot donnée, le modèle 1D peut être utilisé pour l'identification de la relation constitutive pour tout temps t tel que $t < t_c$, avec une erreur relative moyenne pour la vitesse entre les modèles de l'ordre de 1%. Il convient de noter que ce temps critique t_c n'est pas une valeur exacte mais seulement une approximation. Enfin, afin de donner une estimation du temps CPU que l'on peut attendre pour obtenir de tels résultats, les calculs convergés avec le modèle 1D sont généralement 10 fois plus rapides qu'avec le modèle 3D avec les paramètres considérés.

2.4 Champs résiduels induits par la propagation de l'onde de contrainte

2.4.1 Présentation des simulations

Maintenant que la performance du schéma de propagation est validée jusqu'à un temps critique qui dépend de la taille du spot, nous nous concentrons sur les champs résiduels générés par la propagation d'une onde de contrainte, plus précisément les déformations plastiques résiduelles et les contraintes résiduelles. Les développements de la Section 2.2 seront ici encore comparés à un modèle 3D pour différentes tailles de spot laser pour les matériaux déjà indiqués dans la Section 2.3.1. La simulation du grenaillage laser nécessite un changement de configuration.

Description du modèle 1D Pour le modèle 1D, l'épaisseur e est de 10 mm, l'incrément spatial est de $\Delta x = 6 \ \mu m$, de sorte que les calculs convergent tout en gardant une taille de modèle raisonnable. Le nombre de CFL est fixé à 0.9. Encore une fois, le chargement laser se fait selon le profil de pression temporel de la Figure 2.3(a), avec une amplitude de pression de 3 GPa (ce qui est également inférieur à 0,1 κ nous permettant de négliger le comportement hydrodynamique [18], gardant la déformation faible).

Les conditions aux limites sont similaires à celles utilisées pour les simulations de vitesse de la face arrière de la Section 2.3.1 : les conditions aux limites pour $\sigma_{11}(0,t)$, $\sigma_{11}(x,0)$ et $v_1(x,0)$ sont les mêmes que dans l'Equation (2.44) et l'Equation (2.45). Le champ de contraintes résiduelles peut être calculé une fois que l'énergie cinétique totale de l'échantillon a disparu. Pour atteindre cet état dans la simulation, nous appliquons des conditions aux limites non réfléchissantes, afin d'éviter la réflexion de l'onde de contrainte à l'extrémité du modèle. À cette fin, nous utilisons une extrapolation d'ordre zéro [119] des inconnues à la frontière x = e:

$$\begin{cases} \sigma_{11,N}^k = \sigma_{11,N-1}^k \\ v_{1,N}^k = v_{1,N-1}^k \end{cases}$$
(2.47)

Description du modèle Elements Finis : pour la solution de référence EF, nous suivons la méthodologie de Morin et al. [133]. La géométrie est divisée en deux zones, comme illustré sur la Figure 2.6 : (i) une zone centrale rectangulaire de dimension $e \times L$ mm maillée avec des éléments CAX4R dans laquelle nous étudierons les champs mécaniques; (ii) une zone extérieure maillée avec des éléments CINAX4 infinis qui assurent l'absence de réflexion des ondes de contrainte.



FIGURE 2.6 – Représentation du modèle EF utilisé pour les simulations du champ de contraintes résiduelles. La taille du maillage représenté est indiquée uniquement à titre d'illustration, et n'est pas à l'échelle.

Il convient de noter que le maillage représenté sur la Figure 2.6 ne représente pas le maillage réel, qui est trop fin pour être clairement présenté. L'analyse est effectuée avec une étape ABAQUS/Explicit unique [152, 153] d'une durée totale de 20 μ s, afin que la relaxation puisse se produire, et que l'énergie cinétique du système se réduise à une petite fraction de sa valeur initiale. Les conditions aux limites d'encastrement sont appliquées sur le bord inférieur du modèle. La pression maximale appliquée est de P = 3 GPa, le profil temporel restant le même que celui de la Figure 2.3.

Comme la plasticité ne sera pas induite sur la même surface pour tous les cas test, le nombre d'éléments conduisant à des résultats convergés pour les champs résiduels ne sera pas le même non plus. Ainsi, pour chaque diamètre de spot, les résultats EF seront présentés pour un maillage produisant des résultats convergés. De plus, afin d'éviter des modèles avec un trop grand nombre de nœuds, la largeur L de la boîte maillée finement variera également. Il a été vérifié que les résultats du champ de contraintes résiduelles ne présentent aucune variation pour un rapport L/d supérieur ou égal à 2, d désignant le diamètre du spot. Les paramètres sont résumés dans le Tableau 2.2 :

	d = 1 mm	d = 2 mm	d = 3 mm	d = 4 mm	d = 5 mm
L (mm)	2	4	6	8	10
mesh size ($\mu m \times \mu m$)	5×5	10×10	10×10	10×10	10×10

TABLE 2.2 – Maillages utilisés pour les calculs EF.

2.4.2 Résultats

2.4.2.1 Champ de déformations plastiques

Dans cette section, nous analysons le champ de déformations plastiques. Pour cela, une section des résultats 3D est d'abord présentée, ainsi qu'une carte de l'erreur relative entre les résultats 3D et 1D. Comme expliqué ci-dessus, les résultats 1D ne dépendent pas de r contrairement aux résultats EF 3D. La carte de l'erreur relative est calculée en comparant les profils en profondeur des deux modèles, aux différentes distances r du centre pour le modèle 3D. Ces cartes ne seront présentées que dans le cas du matériau 316L, afin de rester concis (voir la Figure 2.7). Des résultats très similaires sont obtenus pour les trois autres matériaux.



FIGURE 2.7 – Distribution de la déformation plastique résiduelle dans le cas de l'acier 316L pour la taille de tache laser de 5 mm. (a) Solution de référence EF 3D. (b) Logarithme (\log_{10}) de l'erreur relative entre le modèle 1D et le modèle 3D.

La Figure 2.7(a) montre le champ de déformation plastique axial axisymétrique pour le modèle EF 3D, dans le cas de l'alliage 316L et pour un diamètre de spot de d = 5 mm. Dans ce cas, on observe que le champ de déformation plastique de la solution de référence EF ne varie que le long de la profondeur x dans un grand domaine radial (pour r entre 0.3 et 2 mm). Dans ce volume, les champs sont proches d'être uniaxiaux, et ressemblent à ceux calculés avec le modèle 1D. Ceci est souligné par la Figure 2.7(b), dans laquelle l'erreur relative entre les deux modèles est la plus faible dans cette zone, avec des valeurs inférieures à 20 %. Ceci n'est cependant pas vrai pour $0 \le r \le 0.3$ mm, et pour r > 2 mm. En effet, la forte déformation plastique observée en surface au centre de l'impact est causée par des ondes radiales provenant des bords du spot laser, se propageant vers l'intérieur et se

2.4. CHAMPS RÉSIDUELS INDUITS PAR LA PROPAGATION DE L'ONDE DE CONTRAINTE

combinant au centre, provoquant une nouvelle évolution plastique du matériau dans cette zone après les premières déformations plastiques causées par l'onde axiale principale, comme le soulignent Ding and Ye [61]. Ces auteurs suggèrent qu'une forme non symétrique du spot laser permettrait d'éviter ces effets, ce qui a été vérifié dans le cas d'un spot carré [39, 58, 104]. De plus, la zone au-delà de r > 2mm correspond à la diminution du profil spatial de la pression (voir Figure 2.3(b)). Elle n'est donc plus assez élevée pour induire des déformations plastiques, de sorte que les déformations plastiques diminuent. Ces résultats suggèrent donc que le modèle 1D peut être comparé aux résultats FE 3D dans le domaine $0.3 \le r \le 2$ mm, ce qui représente environ 60 % de la surface du spot laser. Dans ce qui suit, nous comparons les résultats 1D aux résultats 3D pour des valeurs prises à r = d/4. Les profils de déformation résiduelle (en fonction de la profondeur) sont représentés sur la Figure 2.8 pour les quatre matériaux considérés.



FIGURE 2.8 – Comparaison de la déformation plastique axiale résiduelle entre les modèles 1D et 3D. Les résultats 3D sont pour r = d/4. Différents diamètres de taches laser sont représentés. (a) 12Cr, (b) 316L, (c) Ti-6Al-4V et (d) Al7175-T6.

Les résultats de la Figure 2.8 montrent que la déformation plastique axiale obtenue avec l'approximation 1D et avec le modèle EF 3D à r = d/4 sont quasi identiques pour tous les matériaux considérés. Les déformations plastiques en surface à x = 0 mm sont correctement approximées par le modèle 1D, ainsi que la profondeur affectée plastiquement. Dans cette zone de l'impact, le diamètre du spot a peu d'influence sur le champ de déformation plastique, sauf pour le spot de 1 mm de diamètre, pour lequel quelques légères différences entre les modèles sont observées. Cet effet de taille apparent est lié à la pression appliquée dont le profil temporel est identique pour tous les cas d'essai : la longueur d'onde de l'onde de contrainte étant constante, une modification de la taille du spot peut conduire à des comportements différents.

A partir de ces résultats, on peut considérer (empiriquement) que le modèle 1D est une bonne estimation du modèle 3D lorsque le diamètre du spot utilisé est tel que

$$d > 2L_p, \tag{2.48}$$

où L_p est la profondeur plastiquement affectée définie par Ballard [18] dans le cas d'un matériau élastique parfaitement plastique soumis à un chargement en créneau de durée τ :

$$L_p = \frac{cc_p\tau}{c-c_p} \left\lfloor \frac{6\mu P + A\left(4\mu + 3\kappa\right)}{2A\left(4\mu + 3\kappa\right)} \right\rfloor.$$
(2.49)

Dans l'Equation (2.49), A est la limite élastique du matériau, $\lfloor \cdot \rfloor$ est la fonction donnant la partie entière, c est la vitesse d'onde de contrainte élastique (voir l'Equation (2.18)) et c_p est la vitesse d'onde de contrainte plastique dans un matériau élastique parfaitement plastique donnée par :

$$c_p = \sqrt{\frac{\kappa}{\rho}}.$$
(2.50)

Dans notre cas, le chargement n'est pas une fonction créneau, mais la durée du profil temporel de la Figure 2.3(a) est d'environ 20 ns, l'Equation (2.49) doit donc être utilisée avec $\tau = 20$ ns. Le critère de l'Equation (2.48) a été vérifié pour tous les diamètres de tache laser et pour tous les matériaux affichés sur la Figure 2.8.

2.4.2.2 Champ de contraintes résiduelles

Nous poursuivons avec l'étude des contraintes résiduelles. Tout d'abord, nous examinons la distribution du champ de contraintes résiduelles dans la solution de référence EF 3D (voir Figure 2.9) dans le cas de l'acier 316L. Des résultats similaires sont observés pour les autres matériaux.



FIGURE 2.9 – Distribution des contraintes résiduelles dans le cas de l'acier 316L pour la taille du spot de 5 mm. (a) Solution de référence EF 3D (σ_{22} en MPa) et (b) Logarithme (\log_{10}) de l'erreur relative entre le modèle 1D et le modèle 3D.

2.4. CHAMPS RÉSIDUELS INDUITS PAR LA PROPAGATION DE L'ONDE DE CONTRAINTE

Similairement au champ des déformations plastiques résiduelles (Figure 2.7), on observe sur la Figure 2.9(a) que le champ de contraintes résiduelles de la solution de référence EF varie uniquement le long de la profondeur x dans un grand domaine (0.3 mm $\leq r \leq 2$ mm). Ceci est également confirmé par la Figure 2.9(b), qui montre que l'erreur relative entre le modèle 1D calculée à l'aide de l'Equation (2.37) et le modèle 3D est la plus faible dans cette zone. C'est également dans cette zone que l'erreur est la plus faible pour les valeurs de surface. Suivant la tendance du champ des déformations plastiques, le centre de l'impact à la surface présente une concentration singulière de contraintes résiduelles, jusqu'à 0.3 mm, en raison de la plasticité induite par les ondes radiales convergeant au centre après l'onde axiale principale, comme le rapporte Ding and Ye [61]. Au fur et à mesure que la distance du centre augmente, les contraintes résiduelles tendent vers zéro, à partir de 2 mm. Dans ce qui suit, l'Equation (2.37) est utilisée pour calculer le champ de contraintes résiduelles à partir de la distribution des déformations plastiques (représentée sur la Figure 2.8) dans le modèle 1D. Les résultats du modèle 1D seront comparés à la solution de référence EF 3D à r = d/4 (voir Figure 2.9).



FIGURE 2.10 – Comparaison des contraintes résiduelles entre les modèles 1D et 3D. Les résultats 3D sont pris à r = d/4. Différents diamètres de taches laser sont représentés. Les figures insérées montrent des zooms pour $r \leq 1$ mm. (a) 12Cr, (b) 316L, (c) Ti-6Al-4V et (d) Al7075-T6.

Dans l'ensemble, un bon accord entre les modèles 1D et 3D est observé pour le profil des contraintes résiduelles. Les contraintes résiduelles de surface sont généralement bien reproduites, notamment dans

le cas des matériaux 12Cr (Figure 2.10(a)) et Ti-6Al-4V (Figure 2.10(c)). Pour les matériaux 316L et Al7075-T6, la comparaison s'améliore lorsque la taille de la tache laser augmente, et une comparaison presque parfaite est obtenue pour un diamètre de tache laser supérieur à 9 mm (non représenté sur la Figure 2.10). La profondeur affectée par les contraintes résiduelles de compression est également correctement approximée, avec une erreur maximale d'environ 0.1 mm. En raison de l'expression des contraintes résiduelles avec l'hypothèse de plaque infiniment plane de l'Equation (2.37), les contraintes résiduelles diminuent linéairement une fois que la déformation plastique a atteint zéro, alors que les résultats du modèle EF diminuent à zéro plus rapidement après avoir atteint un maximum. Cependant, certaines différences sont observées lorsque le diamètre de la tache laser diminue, contrairement aux déformations plastiques, pour lesquelles la correspondance était également bonne pour tous les diamètres de taches laser supérieurs à 2 mm. Ces résultats montrent que le modèle 1D peut fournir une bonne approximation des champs mécaniques 3D. Dans les sections suivantes, nous discuterons de la performance du modèle 1D sous différents paramètres.

2.5 Discussion

Les résultats des sections 2.3 et 2.4.2 ont montré que le modèle 1D développé dans la Section 2.2 est capable de reproduire avec succès les résultats FE 3D de référence pour les paramètres typiques utilisés dans le grenaillage laser. Dans cette discussion, nous souhaitons étudier l'effet de l'épaisseur de l'échantillon et l'influence de la pression sur la capacité du modèle 1D à calculer correctement les champs mécaniques résiduels.

Influence de l'épaisseur Les résultats de la Figure 2.8 et de la Figure 2.10 ont montré que le modèle 1D développé dans cet article peut fournir une approximation correcte des champs mécaniques résiduels après la propagation de l'onde de contrainte. Les résultats ont été présentés pour la même épaisseur le long de laquelle les contraintes résiduelles atteignent l'équilibre, c'est-à-dire 10 mm. Nous souhaitons discuter de la sensibilité des résultats en fonction de l'épaisseur, en réalisant des simulations avec des épaisseurs de e = 3 mm et e = 20 mm. Le rapport h/e avec h et e définis dans la Figure 2.2 est donc différent. Les résultats de la Figure 2.8 et de la Figure 2.10 ayant montré que le diamètre du spot a peu d'influence sur les résultats pour les grands spots laser, les résultats suivants seront présentés pour un diamètre de spot de 5 mm. Par ailleurs, les résultats ne seront présentés que dans le cas de l'acier 316L, les conclusions qui en sont tirées étant similaires pour les autres matériaux.



FIGURE 2.11 – Comparaison entre le modèle EF 3D (pour un diamètre de tache laser de 5 mm) et le modèle 1D, avec des épaisseurs de 3 mm et 20 mm, pour l'acier 316L. (a) déformations plastiques résiduelles et (b) contraintes résiduelles.

La Figure 2.11(a) montre une comparaison des déformations plastiques axiales entre les modèles EF et 1D pour deux épaisseurs différentes. Les résultats sont présentés en fonction de la profondeur normalisée par rapport à l'épaisseur. Comme dans le cas de e = 10 mm (Figure 2.8), les déformations plastiques axiales 3D à mi-rayon sont très bien approximées par le modèle 1D pour les deux épaisseurs de 3 mm et 20 mm. Puisqu'il n'y a pas de variation de géométrie dans la zone plastiquement affectée, et puisque les déformations plastiques ne dépendent que de l'amplitude du chargement, obtenir des résultats similaires pour les épaisseurs testées était attendu. Contrairement aux déformations plastiques, le champ de contraintes résiduelles est sensible à la géométrie de l'éprouvette, puisqu'il doit être en équilibre sur toute cette dernière. Par conséquent, les profils de contraintes résiduelles de la Figure 2.11(b) sont différents entre les épaisseurs de 3 mm et 20 mm. Selon la Figure 2.11(b), la comparaison globale entre les modèles 3D et 1D reste bonne pour l'épaisseur de 20 mm, avec une approximation correcte de la profondeur affectée ainsi que des contraintes résiduelles de surface. Cependant, l'épaisseur de 3 mm ne donne pas lieu à une comparaison similaire. En effet, étant donné que les coefficients α et β de l'Equation (2.41) sont plus grands pour une plus petite épaisseur que pour une plus grande, les résultats pour le cas e = 3 mm sont décalés vers des valeurs de contraintes plus petites par rapport aux résultats du cas e = 20 mm, ce qui fait que le modèle 1D surestime le modèle EF 3D dans le cas de 20 mm, et le sous-estime pour le cas de 3 mm. Pour tous les matériaux, l'erreur absolue, moyennée sur la profondeur, entre les résultats 1D et 3D est environ deux fois plus importante pour l'épaisseur de 3 mm (~ 20 MPa) que pour l'épaisseur de 20 mm (~ 10 MPa).

De plus, dans le cas e = 20 mm, il peut être intéressant d'utiliser l'approximation semi-infinie de l'échantillon de l'Equation (2.43). La Figure 2.12 présente une comparaison entre les contraintes résiduelles obtenues par les modèles 1D, avec approximation infiniment plane (avec une épaisseur de 20 mm) et semi-infinie, et avec le modèle EF 3D pour un diamètre de spot de 5 mm. Ces résultats montrent que pour cette épaisseur, les hypothèses de plaque infinie et d'éprouvette semi-infinie sont proches pour les premières centaines de microns, avec notamment des valeurs très proches pour les contraintes résiduelles de surface. Cependant, la profondeur affectée par les contraintes résiduelles de compression est surestimée par l'hypothèse de l'éprouvette semi-infinie pour tous les matériaux (qui ne capture pas les contraintes résiduelles de traction dues à l'équilibre, même si ces contraintes sont faibles). Le champ lointain de la solution de référence, qui est nul, est plus correctement approximé par l'hypothèse d'éprouvette semi-infinie. Cependant, la pente et les valeurs de la solution infiniment plane dans le champ lointain sont telles que cette solution est également proche de zéro. Pour ces raisons, l'hypothèse de la plaque d'épaisseur finie reste une bonne approximation pour les grandes épaisseurs, tandis que l'hypothèse de l'éprouvette semi-infinie est pertinente pour les très grandes épaisseurs.



FIGURE 2.12 – Comparaison des contraintes résiduelles entre les modèles EF 3D (pour un diamètre de tache laser de 5 mm) et 1D, avec les hypothèses d'éprouvette infiniment plane et semi-infinie, pour le matériau 316L.

Influence de la pression Dans ce paragraphe, nous souhaitons discuter de sa sensibilité à la pression appliquée. Nous considérerons donc maintenant une amplitude de 5 GPa, au lieu de 3 GPa comme précédemment. Tous les autres paramètres seront identiques à ceux utilisés dans la Section 2.4. Les résultats ne seront présentés que pour l'acier 316L, la conclusion étant similaire pour les autres matériaux.



FIGURE 2.13 – Comparaison des champs résiduels entre les modèles 1D et 3D pour une amplitude de pression de 5 GPa pour le matériau 316L. (a) Déformation plastique axiale et (b) Contraintes résiduelles.

La Figure 2.13 présente la comparaison entre les modèles 1D et 3D pour les déformations plastiques et les contraintes résiduelles. La tendance des résultats est similaire à celle de la Figure 2.8 et de la

2.6. CONCLUSION

Figure 2.10, mais avec quelques différences. Les déformations plastiques de la Figure 2.13 pour des diamètres de taches de 3 mm à 5 mm et les résultats 1D présentent un plateau de saturation près de la surface, qui était absent des profils de la Figure 2.8. L'interprétation de ces phénomènes peut être trouvée dans les travaux de Ballard [18], qui explique, dans le cas idéal d'un matériau élastique parfaitement plastique, qu'au-dessus d'une amplitude de pression donnée, les déformations plastiques seront induites non seulement pendant le front de chargement de l'onde de choc, mais aussi pendant le front de détente de l'onde (lorsque la contrainte axiale diminue), ce qui entraîne un plateau de saturation, dont la valeur ne dépend que des paramètres du matériau. De plus, la valeur du plateau dans les résultats EF semble être affectée par le diamètre du spot, se rapprochant du modèle 1D lorsque le diamètre du spot augmente. En outre, l'échantillon subit un adoucissement pendant la phase de décharge de l'onde de pression, car la déformation plastique équivalente p continue d'augmenter, mais sa vitesse \dot{p} diminue, en raison du fait que le profil temporel de pression de la Figure 2.3(a) n'est pas symétrique, ce qui conduit à une limite d'élasticité inférieure à celle obtenue pendant la phase de chargement du choc, selon le modèle de Johnson-Cook (Equation (2.5)). Comme l'onde de contrainte est atténuée pendant la propagation, il y a une transition entre la zone où des déformations plastiques sont induites uniquement par la phase de chargement, et la zone où le déchargement induit également des déformations plastiques. Cette transition est marquée sur la Figure 2.13 à $x \sim 0.25$ mm, où les profils de déformation plastique et de contrainte résiduelle présentent une forte évolution. Ce plateau de saturation correspond à la partie adoucie de l'éprouvette, expliquant le comportement des profils de champs résiduels. De plus, comme précédemment, plus la taille du spot est grande, meilleure est la comparaison entre les modèles 1D et 3D. Les contraintes résiduelles de surface sont surestimées pour les petites tailles de tache laser, mais le profil de contrainte est bien approximé, ainsi que la profondeur affectée. Ces résultats semblent indiquer que pour des pressions élevées, le modèle 1D peut à nouveau s'approcher précisément de la solution de référence EF, mais pour des tailles de tache laser importantes. Pour les résultats de la Figure 2.13, des simulations supplémentaires ont montré qu'un meilleur accord des valeurs de surface est obtenu pour un spot laser de 15 mm. Les profils de la Figure 2.13 peuvent également être utilisés pour vérifier les critères de l'Equation (2.48).

Quant aux temps de calcul requis par les deux modèles pour effectuer les calculs, l'algorithme 1D est nettement plus rapide. Il convient de noter que le temps de calcul peut être influencé par le type de matériaux car (i) un matériau à faible limite d'élasticité nécessitera davantage d'étapes de correction plastique (qui prennent plus de temps que le calcul de la propagation purement élastique) et (ii) la condition CFL de l'Equation (2.16) doit être respectée à tout moment. Globalement, pour les champs résiduels avec les paramètres actuels, le modèle 1D est environ 40 fois plus rapide que le modèle 3D (10 secondes en moyennes sont nécessaires pour que le calcul 1D aboutissent sur une installation quelconque).

2.6 Conclusion

Le travail présenté a visé à fournir un modèle 1D permettant d'obtenir une approximation rapide des champs mécaniques induits par une onde de contrainte causée par un impact laser pendant le processus de grenaillage laser. Ce modèle est basé sur une étape de propagation de l'onde de contrainte, qui génère des déformations plastiques, qui sont ensuite utilisées pour calculer le champ de contrainte résiduelle en utilisant une méthode basée sur les déformations libres. La modélisation de l'étape de propagation est basée sur une hypothèse de déformation uniaxiale, qui correspond au comportement

2.6. CONCLUSION

du matériau pour des spots laser de grande taille, sans description de phénomènes d'onde de contrainte provenant des bords de la tache laser. L'étape de propagation est calculée en résolvant un système d'EDP hyperbolique avec un schéma numérique de volumes finis de type Godunov. Cette étape de propagation génère un champ de déformation plastique hétérogène, qui est à l'origine du champ de contraintes résiduelles. Une modélisation analytique basée sur un modèle de plaque permet de relier les déformations plastiques aux contraintes résiduelles. Pour évaluer la pertinence de ce modèle, nous l'avons comparé à un modèle éléments finis, servant de solution de référence, pour plusieurs matériaux et diamètres de tache laser. L'étape de propagation des ondes de contrainte est validée en comparant la vitesse de la face arrière d'une plaque mince impactée sur la face opposée entre le modèle 1D et la solution EF de référence. Pour tous les matériaux, la correspondance est presque parfaite pour les grandes tailles de tache laser, pour lesquelles les effets de bord perturbent tardivement le champ de vitesse. Un autre modèle EF dédié est utilisé pour comparer les champs de déformations plastiques et de contraintes résiduelles. Il met en évidence que ces champs sont uniaxiaux pour la plus grande partie du spot laser, à l'exception des bords et du centre de l'impact, où a lieu une déformation plastique supplémentaire dans le cas d'une forme circulaire du spot laser, en raison des ondes de contrainte radiales qui apparaissent sur les bords, se propagent vers l'intérieur et se concentrent au centre de l'impact. En dehors de ces zones, le modèle 1D donne une approximation très satisfaisante du champ des déformations plastiques par rapport au modèle EF, encore une fois pour les grandes tailles de spot. Pour les contraintes résiduelles, plusieurs différences sont introduites par la modélisation analytique, mais le modèle 1D reste une bonne approximation pour les diamètres de tache laser supérieurs à 2 mm. Des tests supplémentaires ont montré que le modèle 1D reste pertinent pour les grandes épaisseurs (à partir de 10 mm et plus), mais moins pour les petites épaisseurs (autour de 3 mm). Ces résultats suggèrent que le modèle 1D peut être utilisé pour calculer une première approximation des champs mécaniques introduits par un impact laser. Une telle approximation est plus rapide à calculer, le modèle 1D étant en moyenne un ou deux ordres de grandeur plus rapide (ceci dépend cependant fortement des machines utilisées, ainsi que des options de parallélisation des calculs). Ce travail ouvre les perspectives suivantes :

- Pour un matériau dont le comportement est déjà connu, le modèle 1D pourrait être utilisé pour avoir une première estimation du champ de contraintes résiduelles induites, avant d'affiner les résultats avec des modèles plus complexes. Le modèle 1D pourrait ainsi être utilisé pour effectuer une première optimisation des paramètres du procédé.
- Dans le cas où les paramètres du matériau sont inconnus, ce modèle 1D peut être utilisé efficacement comme outil de calibration. En effet, même si le modèle de Johnson-Cook n'a que quelques paramètres, leur identification peut être coûteuse et prendre beaucoup de temps lorsqu'on utilise des simulations EF 3D [15, 126, 172]. Sur la base de mesures expérimentales appropriées (vitesse de la face arrière ou contraintes résiduelles en profondeur) pour un matériau aux propriétés inconnues, le modèle 1D peut être utilisé pour identifier rapidement les paramètres rhéologiques utilisés pour décrire le comportement du matériau en fonction de la vitesse de déformation.

Le modèle 1D présenté dans ce travail est disponible gratuitement en ligne sous la forme d'un code python appelé EVEREST (strEss waVE pRopagation and rESidual STress solver) sous licence LGPL. L'utilisation de ce code ne nécessite qu'une installation de Python et des packages scientifiques standards, et ainsi aucun logiciel commercial ou connaissance de la modélisation par éléments finis. Son utilisation et ses résultats sont donc plus rapides que les codes éléments finis.

Chapitre 3

Modélisation et simulation de la propagation d'une onde de contrainte dans un matériau hétérogène élasto-plastique

Contenu

3.1	Intro	duction	76			
3.2	Modélisation mécanique d'ondes de contrainte dans un matériau laminé					
	3.2.1	Equations élasto-plastique	78			
	3.2.2	Cas uniaxial	79			
	3.2.3	Equation de l'onde de contrainte	81			
3.3	Homo	ogénéisation élasto-plastique d'un matériau laminé dans des conditions quasi-				
	statiq	ues	83			
	3.3.1	Tenseur des rigidités effectif	83			
	3.3.2	Tenseur des déformations plastiques effectif	84			
	3.3.3	Comportement élasto-plastique effectif incrémental	85			
3.4	Simul	ation numérique de la propagation d'une onde de choc dans un matériau élasto-				
	plasti	que laminé	88			
	3.4.1	Implémentation numérique	88			
	3.4.2	Description des simulations	88			
	3.4.3	Propagation de l'onde de contrainte axiale estimée par le modèle MHE	97			
	3.4.4	Hétérogénéité des champs locaux de déformation plastique estimée par le mo- dèle MHE	99			
	3.4.5	Champ moyen des déformations plastique estimé par le modèle MHE	101			
	3.4.6	Commentaires sur les conditions de chargement	104			
3.5	Discussion					
3.6	Conclusion					

3.1. INTRODUCTION

Le chapitre 2 a permis d'introduire les notions principales de la simulation du choc laser à travers la modélisation de la propagation d'une onde de contrainte unidimensionnelle dans un matériau homogène. Comme annoncé dans l'introduction, le but de ce travail est d'introduire une description de l'hétérogénéité des alliages métalliques traités par grenaillage laser. Cette tache nécessitera de faire appel au formalisme de plasticité cristalline, dont des éléments ont été présenté dans le chapitre 1. Cependant, ces développements étant de nature complexe, une étape intermédiaire est considérée. Dans ce chapitre, les méthodes de modélisation de résolution numérique vont être appliquées à un matériau hétérogène, toujours dans le cadre d'une déformation uniaxiale. Cette étude de cas académique permet néanmoins d'observer certains effets d'une distribution hétérogène des propriétés du matériau sur la propagation d'onde de contrainte, et sur le champ de déformations plastiques induit. L'inconvénient de cette approche dite en champ complet est qu'elle nécessite un maillage fin afin de faire converger les résultats, ce qui mène, dans le cadre d'une procédure en dynamique explicite, à des temps de calculs longs. Une solution à ce problème est donc équiement étudiée dans ce ce chapitre via une approche d'homogénéisation élasto-plastique, qui permettrait de capturer les effets de la structure hétérogène sur la propagation élasto-plastique pour des temps de calculs plus courts. Ces deux approches sont finalement comparées, et des limites de l'approche d'homogénéisation sont étudiées.

Ce chapitre est la traduction en français d'un article publié dans International Journal of Solids and Structures [112]. L'Annexe B est également traduite de cet article. Des ajouts sont néanmoins réalisés : Tableau 3.2, Section 3.4.2.1, Figure 3.9, Section 3.4.3, Figure 3.13, Figure 3.16.

3.1 Introduction

Le procédé mécanique qui motive ce travail est le grenaillage laser, ou Laser Shock Peening (LSP). Le procédé consiste à impacter la surface d'une cible métallique avec un faisceau laser de haute intensité $(>GW/cm^2)$, produisant un plasma à haute pression de l'ordre du GPa. En réponse à cette sollicitation, une onde de choc se propage à travers l'échantillon et génère une déformation plastique, comme l'illustre la Figure 3.1(a). Lors de la relaxation, cela induit des contraintes résiduelles de compression dans l'éprouvette. Il a été démontré que ces contraintes résiduelles augmentent la résistance à la fatigue de l'échantillon traité [59, 151, 154]. Dans la configuration expérimentale standard, l'interaction est confinée par de l'eau [69] permettant une meilleure efficacité. Un revêtement de protection peut être utilisé pour éviter que de forts effets thermiques n'induisent des contraintes de traction sur la face impactée. Un profil de pression typique du plasma est présenté dans la Figure 3.1(b) [64, 153]. Sa durée est généralement de quelques dizaines de nanosecondes. Le LSP trouve des applications dans l'industrie aéronautique, ainsi que dans l'industrie énergétique, où de nombreuses pièces et machines peuvent bénéficier de traitements de protection contre la fatigue [50, 132].



FIGURE 3.1 – Procédé de grenaillage laser. (a) Représentation du procédé (d'après Scius-Bertrand et al. [171]). (b) Profil typique de la pression normalisée au centre de l'impact [153].

La modélisation analytique et numérique du LSP a été étudiée au fil des ans, en commençant par les travaux fondamentaux de Ballard [18] et Braisted [28]. Le principe est de simuler la propagation d'ondes élasto-plastiques qui sont produites par une impulsion de contrainte dynamique. Dans la plupart des travaux, les spécimens impactés sont supposés être homogènes et présenter un comportement mécanique isotrope, avec un comportement élastique décrit par une équation d'état (EOS) [152, 155] si nécessaire, ou avec un comportement purement élastique [179]. Concernant le comportement plastique, le modèle le plus utilisé à des hautes vitesses de déformation est le modèle de Johnson-Cook. [93]. D'autres auteurs ont également étudié l'effet du LSP sur des monocristaux. [188, 191] et bicristaux [189] à la fois expérimentalement et numériquement, en utilisant des modèles de comportement basés sur la plasticité cristalline. Les contraintes résiduelles sont ensuite calculées à partir du champ de déformation plastique résiduelle généré par la propagation des ondes plastiques. Plusieurs paramètres du procédé peuvent être explorés à l'aide de simulations numériques, comme le taux de recouvrement de plusieurs impulsions laser [34, 44].

Avec une taille de spot laser généralement de quelques millimètres, l'obtention des pressions souhaitées avec le LSP nécessite une source laser de haute puissance. La taille millimétrique du spot rend également difficile les traitements de surface dans les environnements fermés et les applications de maintenance. L'utilisation d'un faisceau laser à faible énergie peut être une alternative car l'ensemble du système peut alors être plus compact et le faisceau laser peut être transporté par une fibre optique. Cependant, cela implique des diamètres de spot laser submillimétriques [168, 205]. Il s'agit du micro-LSP. Pour certains matériaux (par exemple les alliages d'aluminium), la taille des tâches laser est alors proche de la taille du grain, ce qui invalide l'approche macroscopique et homogène des travaux précédents sur la modélisation des LSP.

L'étude des interactions entre l'onde de choc et la microstructure devient donc nécessaire lorsque le diamètre du spot laser est petit, comme dans le cas du micro-LSP. De plus, il est possible que la prise en compte de la forme allongée des grains et/ou de la distribution non aléatoire des orientations des grains, très souvent rencontrées dans la plupart des alliages industriels (et connues sous le nom

3.2. MODÉLISATION MÉCANIQUE D'ONDES DE CONTRAINTE DANS UN MATÉRIAU LAMINÉ

de textures morphologiques et cristallographiques dans la littérature), est un prérequis pour améliorer le contrôle de l'effet du LSP. Le problème à traiter est donc la propagation d'une onde de contrainte dans un matériau élasto-plastique hétérogène (polycristalline). Bien que la propagation des ondes de contraintes élastiques dans les milieux hétérogènes ait été largement étudiée [22, 185], notamment pour les applications sismologiques, l'étude numérique des ondes de choc élasto-plastiques dans les milieux hétérogènes est rare ([4, 47, 48] se sont concentrés notamment sur les ondes de choc sans effets plastiques). En raison des non-linéarités apportées par la plasticité, la simulation numérique des ondes de contrainte dans les matériaux hétérogènes nécessite notamment des solveurs numériques spécifiques pour les équations hyperboliques n'induisant pas d'oscillations parasites ni d'amortissement.

Du point de vue de la modélisation, la question de l'homogénéisation des milieux hétérogènes élastoplastiques dans des conditions dynamiques est également intéressante afin de diminuer le temps de calcul des simulations en champ complet (permettant la description spatiale des hétérogénéités). Dans des conditions quasi-statiques, le comportement élastique macroscopique d'un matériau hétérogène peut généralement être déterminé à partir de la description de ses constituants locaux à l'aide de techniques d'homogénéisation [127]. Plusieurs travaux ont été proposés pour enrichir les techniques d'homogénéisation. En présence d'effets dynamiques, l'équation d'onde homogénéisée a été étudiée au moyen d'un filtre spatial qui permet de séparer les échelles du milieu hétérogène [40, 41]. Plusieurs auteurs [13, 131, 192] proposent de prendre en compte le phénomène de micro-inertie qui apparait lors de la sollicitation dynamique d'une structure hétérogène. D'autre part, des modèles analytiques ont été développés pour étendre les techniques d'homogénéisation à la plasticité (mais dans des conditions quasi-statiques) pour des microstructures stratifiées idéales [45, 83]. Cependant, en présence d'effets à la fois *dynamiques* et *plastiques*, les techniques d'homogénéisation doivent encore être développées.

Le but de cet article est d'étudier numériquement la propagation d'une onde de choc dans une éprouvette hétérogène élasto-plastique, afin d'évaluer l'effet de la microstructure sur les distributions de déformation plastique résiduelle. Pour ce faire, le cas d'un échantillon stratifié soumis à un état de déformation uniaxial sera considéré. Ceci permet d'étudier numériquement l'effet d'une microstructure sur la propagation des ondes élasto-plastiques (et le champ de déformation plastique résiduelle). De plus, à cause du fait que ces simulations en champ complet peuvent être coûteuses en termes de temps de calcul, un modèle MHE (Milieu Homogénéisé Equivalent) approché, basé sur la solution quasistatique du laminé élasto-plastique, sera également présenté pour traiter l'effet de l'hétérogénéité du matériau.

L'article est organisé comme suit. La Section 3.2 défini le cadre mécanique général d'un spécimen stratifié hétérogène, que sera ensuite utilisé pour modéliser la propagation des ondes de contrainte. La Section 3.3 se concentre sur le développement d'un modèle élasto-plastique MHE basé sur des conditions de chargement quasi-statiques. Enfin, la Section 3.4 concerne l'étude de la propagation de l'onde de choc dans des spécimens élasto-plastiques stratifiés, en utilisant à la fois des descriptions en champ complet et basées sur le modèle MHE.

3.2 Modélisation mécanique d'ondes de contrainte dans un matériau laminé

3.2.1 Equations élasto-plastique

Le LSP introduit, par le biais d'un plasma à haute pression produit par un laser, des ondes de contrainte dans l'échantillon. Le comportement mécanique (local) du matériau cible est supposé être élasto-plastique¹ et obéit aux équations dynamiques suivantes :

 $\begin{cases} \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) = \rho \frac{\partial^2 \boldsymbol{u}}{\partial t^2} & \text{Equilibre local} \\ \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_e = \mathbb{C} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_p) & \text{Comportement élastique} \\ \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) = \frac{1}{2} (\nabla \boldsymbol{u} + \nabla^{\mathrm{T}} \boldsymbol{u}) & \text{Relation contrainte déplacement} \\ g = J_2 \left(\boldsymbol{\sigma} - \mathbf{X} \right) - R \left(p \right) \leq 0 & \text{Critère de plasticité} \\ \left\{ \begin{array}{l} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = \dot{\lambda} \frac{\partial g}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \\ \dot{\boldsymbol{\lambda}} \geq 0 \\ \dot{\boldsymbol{\lambda}}g = 0, \end{array} \right. & \text{Règle de normalité et condition de consistence} \end{array}$ (3.1)

où les inconnues sont le tenseur des contraintes σ , le tenseur des déformations ε_p et le champ de déplacement u. Dans le système (3.1), ε_e est le tenseur des déformations plastiques, ρ est la masse volumique locale, \mathbb{C} est le tenseur de rigidité local², g est le seuil plastique, \mathbf{X} est une « backstress » (utilisée pour l'écrouissage cinématique), R est une fonction d'écrouissage isotrope, p est la déformation plastique cumulée et $\dot{\lambda}$ est le multiplicateur plastique. Le critère de plasticité adopté est isotrope où J_2 est donné par

$$J_2(\boldsymbol{\sigma}) = \sqrt{\frac{3}{2} \left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{3} \operatorname{Tr}(\boldsymbol{\sigma}) \boldsymbol{I}\right) : \left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{3} \operatorname{Tr}(\boldsymbol{\sigma}) \boldsymbol{I}\right)},$$
(3.2)

où I est le tenseur identité du second ordre.

3.2.2 Cas uniaxial

Comme mentionné dans l'introduction, notre objectif est d'étudier l'effet d'une microstructure sur la propagation des ondes élasto-plastiques. Dans ce chapitre le cas simplifié d'une structure de type *laminé* est considéré ce qui permet d'étudier les principales caractéristiques du LSP en une dimension. L'ansatz 1d suivant est donc considéré :

1. Hypothèses sur les propriétés mécaniques. En ce qui concerne la description de la microstructure, il est supposé que le domaine spatial est divisé en un grand nombre de couches, chacune ayant son propre comportement mécanique local. Anticipant les développements à venir, le choix est fait de considérer une microstructure périodique constituée de deux phases de fraction volumique f_1 et f_2 respectivement. Cela correspond à un matériau composite avec une répétition périodique de couches dont les propriétés mécaniques varient de l'une à l'autre, comme représenté sur la Figure 3.2. Enfin, les interfaces entre les couches sont supposées parfaites. Les champs de propriétés mécaniques ne dépendent donc que de la variable x_1 :

$$\rho = \rho(x_1), \quad \mathbb{C} = \mathbb{C}(x_1), \quad \sigma_Y = \sigma_Y(x_1).$$
(3.3)

Le comportement élastique des phases locales sera supposé être isotrope, de sorte que l'ensemble du problème présente une isotropie transverse. Dans ce cas, le tenseur de rigidité \mathbb{C} devient

$$\mathbb{C}(x_1) = 3\kappa(x_1)\mathbb{J} + 2\mu(x_1)\mathbb{K},\tag{3.4}$$

^{1.} Pour des raisons de simplicité, les effets de la sensibilité à la vitesse de déformation ne sont pas pris en compte dans ce chapitre.

^{2.} En supposant que le comportement élastique est indépendant de la pression appliquée, la loi de Hooke peut être utilisée.

où κ et μ sont respectivement les modules de compressibilité et de cisaillement, et \mathbb{J} et \mathbb{K} sont des tenseurs du quatrième ordre définis tels que

$$\mathbb{J} = \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \quad \text{and} \quad \mathbb{K} = \mathbb{I} - \mathbb{J}, \tag{3.5}$$

avec I l'identité du second ordre et \mathbb{I} l'identité du quatrième ordre. La représentation matricielle à 2 indices (en utilisant la convention de Kelvin, voir par ex. Morin et al. [134]) du tenseur des rigidités s'écrit :

$$\mathbb{C}(x_1) = \begin{pmatrix} C_{1111}(x_1) & C_{1122}(x_1) & C_{1122}(x_1) & 0 & 0 & 0 \\ C_{1122}(x_1) & C_{1111}(x_1) & C_{1122}(x_1) & 0 & 0 & 0 \\ C_{1122}(x_1) & C_{1122}(x_1) & C_{1111}(x_1) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2C_{1212}(x_1) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2C_{1212}(x_1) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2C_{1212}(x_1) \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

avec $2C_{1212}(x_1) = C_{1111}(x_1) - C_{1122}(x_1) = 2\mu(x_1)$ et $C_{1122}(x_1) = \kappa(x_1) - 2\mu(x_1)/3$. Afin d'unifier les notations lors des prochains développements, les coefficients C_{ijkl} seront utilisés dans tous les calculs.



FIGURE 3.2 – Représentation du spécimen laminé. La pression du plasma est appliquée vers la gauche sur le spécimen de longueur L et comprenant de nombreuses couches. La direction e_1 désigne la direction de la propagation des ondes 1D.

2. Hypothèses sur le modèle de plasticité. Pour des raisons de simplicité, un modèle élastique parfaitement plastique est considéré. La « backstress » X est donc nulle et l'écrouissage isotrope R(p) est constant.

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{0} \quad \text{and} \quad R(p) = \sigma_Y, \tag{3.7}$$

où σ_Y est la limite élastique locale.

3. Hypothèses sur les champs mécaniques. Les champs mécaniques sont supposés être axisymétriques par rapport à l'axe de propagation, noté par e_1 . Ce choix est principalement motivé par le fait que le laser utilisé dans les conditions expérimentales a un spot circulaire, appliqué au centre du spécimen. De plus, il est considéré que ces champs ne dépendent que d'une seule dimension spatiale correspondant à l'axe de symétrie e_1 (en plus de leur dépendance temporelle t), i.e. tous les gradients par rapport à x_2 et x_3 disparaissent, et que l'éprouvette présente un comportement mécanique isotrope. Le tenseur de déformation est supposé être uniaxial, selon la direction e_1 . Cette hypothèse, qui fait suite aux travaux antérieurs [18], est raisonnable à condition que la durée des impacts soit courte (par exemple moins de quelques centaines de nanosecondes pour un matériau en acier). Ce faisant, cependant, la description de la propagation
des ondes radiales est perdue, et la description de l'état du matériau près du bord de la tache laser, qui peut être le lieu d'importantes contraintes de cisaillement. Ces questions spécifiques sont laissées pour des travaux futurs. Le champ de déplacement u et le tenseur des déformations totales ε sont donc supposés être de la forme

$$\boldsymbol{u} = u_1(x_1, t)\boldsymbol{e}_1, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \varepsilon_{11}(x_1, t)\boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_1, \tag{3.8}$$

où $\varepsilon_{11} = \partial u_1 / \partial x_1$, et x_1 est la coordonnée selon e_1 . De plus, l'hypothèse (classique) que la plasticité est incompressible est utilisée, de sorte que le tenseur de déformation plastique ε^p est de la forme

$$\boldsymbol{\varepsilon}_p = \varepsilon_{p,11}(x_1,t) \left(\boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_1 - \frac{1}{2} \boldsymbol{e}_2 \otimes \boldsymbol{e}_2 - \frac{1}{2} \boldsymbol{e}_3 \otimes \boldsymbol{e}_3 \right).$$
(3.9)

De par la symétrie matérielle et la forme de ε donnée dans l'Equation (3.8), la forme du tenseur des contraintes σ est

$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma_{11}(x_1, t) \boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_1 + \sigma_{22}(x_1, t) \left(\boldsymbol{e}_2 \otimes \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3 \otimes \boldsymbol{e}_3 \right).$$
(3.10)

En résumé, nous avons maintenant les expressions suivantes pour σ_{11} , σ_{22} and $J_2(\boldsymbol{\sigma})$:

$$\sigma_{11} = C_{1111}\varepsilon_{11} + (C_{1122} - C_{1111})\varepsilon_{p,11},$$

$$\sigma_{22} = \sigma_{33} = C_{1122}\varepsilon_{11} + \frac{C_{1111} - C_{1122}}{2}\varepsilon_{p,11},$$

$$J_2(\boldsymbol{\sigma}) = |\sigma_{11} - \sigma_{22}|.$$
(3.11)

3.2.3 Equation de l'onde de contrainte

En utilisant les hypothèses précédentes, les équations de propagation des ondes de contrainte peuvent être présentées pendant la propagation élastique et la propagation plastique pour ce problème 1d simplifié.

3.2.3.1 Propagation élastique

Tout d'abord, la réponse du matériau est supposée purement élastique, de sorte que $\dot{\varepsilon}_p = 0$. Puisque les champs mécaniques ne dépendent spatialement que de la variable x_1 , les deux premières équations du système (3.1) mènent au système aux dérivées partielles suivant

$$\begin{cases}
\frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x_1}(x_1,t) = \rho(x_1) \frac{\partial v_1}{\partial t}(x_1,t) \\
\frac{\partial \sigma_{11}}{\partial t}(x_1,t) = C_{1111}(x_1) \frac{\partial v_1}{\partial x_1}(x_1,t),
\end{cases}$$
(3.12)

où v_1 est la vitesse mécanique, définie par $v_1 = \partial u_1 / \partial t$. Le système (3.12) peut être exprimé sous la forme matricielle suivante :

$$\boldsymbol{U}_t + \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{U}_{x_1} = 0, \tag{3.13}$$

où les dérivées partielles sont désignées par les indices x_1 et t. Dans l'Equation (3.13), U et A sont définis par

$$\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ v_1 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 0 & -C_{1111} \\ -\frac{1}{\rho} & 0 \end{pmatrix}.$$
(3.14)

L'Equation (3.13) est connue sous le nom d'équation d'advection, et décrit la propagation des ondes de contrainte. La matrice A a deux valeurs propres, correspondant toutes deux, en valeur absolue, à la vitesse axiale de l'onde dans le matériau :

$$c(x_1) = \sqrt{\frac{C_{1111}(x_1)}{\rho(x_1)}}.$$
(3.15)

Il est intéressant de noter que ce problème de propagation peut être écrit de manière alternative en considérant le seul déplacement comme l'inconnue. Cela conduirait à l'équation d'onde pour les déplacements u_1 :

$$\frac{C_{1111}(x_1)}{\rho(x_1)}\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} = \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2}.$$
(3.16)

Le phénomène physique décrit par l'Equation (3.16) est le même que pour l'Equation (3.13), mais l'inconnue est différente. Bien que mathématiquement équivalentes, les deux équations ne peuvent être résolues par les mêmes méthodes numériques. La résolution de l'Equation (3.16) peut être sujet à des artefacts numériques, comme il en sera sujet dans la Section 3.4.1.

3.2.3.2 Propagation plastique

Dans le cas d'un comportement plastique, l'incrément de déformation plastique $\dot{\varepsilon}_p$ est non nul. Avec l'hypothèse d'axisymétrie du tenseur des contraintes, la forme incrémentale du critère de plasticité conduit à une relation explicite entre l'incrément de déformation plastique longitudinale $\dot{\varepsilon}_{p,11}$ et l'incrément de déformation totale $\dot{\varepsilon}_{11} = \partial v_1 / \partial x_1$:

$$\dot{\varepsilon}_{p,11} = \alpha \dot{\varepsilon}_{11} = \alpha \frac{\partial v_1}{\partial x_1},\tag{3.17}$$

où α est donné dans notre cas par :

$$\alpha = \frac{2}{3}.\tag{3.18}$$

La forme incrémentale du critère de plasticité se lit comme suit :

$$\dot{J}_2\left(\boldsymbol{\sigma}\right) = 0. \tag{3.19}$$

Par conséquent, en considérant (3.8), (3.9) et (3.11), les équations de propagation élasto-plastique se réduisent, pour l'ansatz considéré, à

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x_1} = \rho \frac{\partial v_1}{\partial t} \\ \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial t} = (C_{1111} (1 - \alpha) + \alpha C_{1122}) \frac{\partial v_1}{\partial x_1}. \end{cases}$$
(3.20)

Comme dans le cas élastique, ce système peut être écrit sous forme de matrice (3.13), où U et A sont cette fois donnés par

$$\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ v_1 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 0 & C_{1111} \left(\alpha - 1 \right) - \alpha C_{1122} \\ -\frac{1}{\rho} & 0 \end{pmatrix}.$$
(3.21)

La résolution de ce système permet de déterminer l'incrément de déformation $\dot{\sigma}_{11}$ ce qui permet de déterminer l'incrément de déformation axiale $\dot{\varepsilon}_{11}$ en utilisant l'Equation (3.20)(b) et finalement la détermination de $\dot{\varepsilon}_{p,11}$ en utilisant l'Equation (3.17). Cette manière de procéder est différente de celle présentée dans la Section 2.2.1. Les différences entre ces deux méthodes sont discutées dans l'Annexe A.

3.3 Homogénéisation élasto-plastique d'un matériau laminé dans des conditions quasi-statiques

L'objectif de cette section est de développer un modèle MHE du stratifié considéré dans la Section 3.2. Nous considérons le cas où les deux phases partagent la même masse volumique ρ . Ainsi, au lieu d'homogénéiser l'équation d'onde avec un comportement élasto-plastique des phases (comme cela a été fait par Capdeville et al. [40] en élasticité seulement, avec la définition d'une masse volumique effective $\tilde{\rho} = \langle \rho \rangle$, où $\langle \cdot \rangle$ est l'opérateur de moyenne spatiale défini par l'Equation (3.24)) l'homogénéisation de la microstructure du stratifié est considérée *dans des conditions quasi-statiques*, suite aux travaux précédents [45, 83]. Cela permettra de définir le comportement élasto-plastique de l'échantillon stratifié basé sur le MHE, dont le comportement dépend de plusieurs variables internes liées à sa microstructure, qui sera ensuite utilisé dans l'équation de propagation des ondes. Nous ferons l'hypothèse dans ce travail de négliger l'influence de la micro inertie (voir [13, 131, 192]), dont la prise en compte a pour effet de rajouter des termes à l'équation de propagation d'onde, qui font intervenir des dérivées temporelles et spatiales couplées, rendant impossible la résolution numérique envisagée (qui sera décrite dans la Section 3.4.1.

Nous commençons par la détermination des tenseurs de rigidité effective et de déformation plastique, pour un état mécanique initial donné.

3.3.1 Tenseur des rigidités effectif

La relation constitutive élastique effective est la suivante

$$\overline{\boldsymbol{\sigma}} = \widetilde{\mathbb{C}} : \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_e, \tag{3.22}$$

où \mathbb{C} est le tenseur (inconnu) de rigidité effectif, $\overline{\sigma}$ est le tenseur des contraintes macroscopiques et $\tilde{\varepsilon}_e$ est le tenseur des déformations élastiques effectives. Les tenseurs des contraintes et déformations macroscopiques sont définis par

$$\overline{\boldsymbol{\sigma}} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle, \quad \overline{\boldsymbol{\varepsilon}} = \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle. \tag{3.23}$$

Dans l'Equation (3.23), l'opérateur $\langle \cdot \rangle$ est la moyenne spatiale sur le domaine V définie par

$$\langle f \rangle = \frac{1}{\operatorname{vol}(V)} \int_{V} f \mathrm{d}V.$$
 (3.24)

Afin de déterminer le tenseur des rigidités $\widetilde{\mathbb{C}}$ les propriétés (classiques) des stratifiés sont utilisées, c'est-à-dire l'uniformité de la contrainte axiale et de la déformation dans le plan :

$$\sigma_{11} = \overline{\sigma}_{11}, \quad \sigma_{12} = \overline{\sigma}_{12}, \quad \sigma_{13} = \overline{\sigma}_{13}, \quad \varepsilon_{22} = \overline{\varepsilon}_{22}, \quad \varepsilon_{33} = \overline{\varepsilon}_{33}, \quad \varepsilon_{23} = \overline{\varepsilon}_{23}, \tag{3.25}$$

ainsi que les états de contrainte et de déformation homogènes par phase dans les deux phases, qui sont des propriétés exactes également valables lorsque les phases se déforment plastiquement comme examiné dans la section suivante [83, 127, 156]. Ces relations conduisent à la définition du tenseur de rigidité effectif, qui décrit un comportement isotrope transversal par symétrie matérielle. En utilisant la notation de Kelvin, \mathbb{C} devient

$$\widetilde{\mathbb{C}} = \begin{pmatrix} \widetilde{C}_{1111} & \widetilde{C}_{1122} & \widetilde{C}_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ \widetilde{C}_{1122} & \widetilde{C}_{2222} & \widetilde{C}_{2233} & 0 & 0 & 0 \\ \widetilde{C}_{1122} & \widetilde{C}_{2233} & \widetilde{C}_{2222} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\widetilde{C}_{2323} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\widetilde{C}_{1313} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\widetilde{C}_{1313} \end{pmatrix},$$

$$(3.26)$$

où les composantes non nulles sont données par 3

$$\widetilde{C}_{1111} = \left\langle \frac{1}{C_{1111}} \right\rangle^{-1}, \quad \widetilde{C}_{2222} = \left\langle C_{1111} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{C_{1111}} \right\rangle^{-1} \left\langle \frac{C_{1122}}{C_{1111}} \right\rangle^2 - \left\langle \frac{C_{1122}^2}{C_{1111}} \right\rangle, \\
\widetilde{C}_{1122} = \left\langle \frac{1}{C_{1111}} \right\rangle^{-1} \left\langle \frac{C_{1122}}{C_{1111}} \right\rangle, \quad \widetilde{C}_{2233} = \left\langle C_{1122} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{C_{1111}} \right\rangle^{-1} \left\langle \frac{C_{1122}}{C_{1111}} \right\rangle^2 - \left\langle \frac{C_{1122}^2}{C_{1111}} \right\rangle, \quad (3.27)$$

$$\widetilde{C}_{1313} = \left\langle \frac{1}{C_{1212}} \right\rangle^{-1}, \quad 2\widetilde{C}_{2323} = 2 \left\langle C_{1212} \right\rangle = \widetilde{C}_{2222} - \widetilde{C}_{2233}.$$

3.3.2 Tenseur des déformations plastiques effectif

Maintenant que l'expression du tenseur des rigidités effectif a été donnée, nous cherchons l'expression du tenseur des déformations plastiques effectif $\tilde{\epsilon}_p$ afin qu'il vérifie

$$\overline{\boldsymbol{\sigma}} = \widetilde{\mathbb{C}} : (\overline{\varepsilon} - \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_p) = \langle \mathbb{C} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_p) \rangle, \quad \text{et} \quad \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_e = \overline{\boldsymbol{\varepsilon}} - \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_p.$$
(3.28)

Nous rappelons ici que la plasticité locale est incompressible (c'est-à-dire que la trace du tenseur des déformations plastiques local est nulle). Détaillons d'abord l'expression de la déformation locale ε_{11} et de la contrainte σ_{22} (qui vérifie aussi $\sigma_{22} = \sigma_{33}$) :

$$\begin{cases} \varepsilon_{11} = \frac{1}{C_{1111}} \sigma_{11} - \varepsilon_{p,11} \left(\frac{C_{1122}}{C_{1111}} - 1 \right) \\ \sigma_{22} = C_{1122} \varepsilon_{11} + \varepsilon_{p,11} \frac{C_{1111} - C_{1122}}{2}. \end{cases}$$
(3.29)

En injectant la première équation de (3.29) dans la seconde, et en prenant la valeur moyenne des deux équations, le système suivant est obtenu :

$$\begin{cases} \overline{\varepsilon}_{11} = \left\langle \frac{1}{C_{1111}} \right\rangle \overline{\sigma}_{11} - \left\langle \varepsilon_{p,11} \left(\frac{C_{1122}}{C_{1111}} - 1 \right) \right\rangle \\ \overline{\sigma}_{22} = \left\langle \frac{C_{1122}}{C_{1111}} \right\rangle \overline{\sigma}_{11} + \left\langle \varepsilon_{p,11} \left(\frac{C_{1122} + C_{1111}}{2} - \frac{C_{1122}^2}{C_{1111}} \right) \right\rangle. \end{cases}$$
(3.30)

3. Les détails des calculs conduisant à la définition du tenseur de rigidité effectif sont donnés dans l'Annexe B.1.

Ensuite, les quantités sans dimension intermédiaires suivantes sont définies

$$M_{1} = \left\langle \varepsilon_{p,11} \left(\frac{C_{1122}}{C_{1111}} - 1 \right) \right\rangle \quad \text{and} \quad M_{2} = \frac{1}{\tilde{C}_{1122}} \left\langle \varepsilon_{p,11} \left(\frac{C_{1111} + C_{1122}}{2} - \frac{C_{1122}^{2}}{C_{1111}} \right) \right\rangle, \tag{3.31}$$

qui seront utiles pour relier la déformation plastique locale à la déformation plastique effective. Le système (3.30) est maintenant reposé de manière à séparer les contraintes et les déformations :

$$\begin{cases} \overline{\sigma}_{11} = \widetilde{C}_{1111}\overline{\varepsilon}_{11} + \widetilde{C}_{1111}M_1 \\ \overline{\sigma}_{22} = \widetilde{C}_{1122}\overline{\varepsilon}_{11} + \widetilde{C}_{1122}(M_1 + M_2). \end{cases}$$
(3.32)

Il est alors possible d'identifier les composantes non nulles de la déformation plastique effective à partir de l'Equation (3.32):

$$\begin{cases} \tilde{\varepsilon}_{p,11} = -M_1 + \frac{2\tilde{C}_{1122}^2}{\tilde{C}_{1111}\left(\tilde{C}_{2222} + \tilde{C}_{2233}\right) - 2\tilde{C}_{1122}^2} M_2 \\ \tilde{\varepsilon}_{p,22} = \tilde{\varepsilon}_{p,33} = \frac{\tilde{C}_{1111}\tilde{C}_{1122}}{2\tilde{C}_{1122}^2 - \tilde{C}_{1111}\left(\tilde{C}_{2222} + \tilde{C}_{2233}\right)} M_2. \end{cases}$$

$$(3.33)$$

Quelques commentaires s'imposent :

- Contrairement aux contraintes macroscopiques, aux déformations élastiques et aux déformations totales, la déformation plastique effective n'est pas définie par le calcul de la moyenne de la quantité locale correspondante, à savoir $\tilde{\epsilon}_p \neq \langle \epsilon_p \rangle$, qui est une propriété classique dans l'homogénéisation élasto-plastique [45, 83].
- La déformation plastique effective n'est pas incompressible (Tr $(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_p) \neq 0$) contrairement à la déformation plastique locale qui vérifie la propriété d'incompressibilité (Tr $(\boldsymbol{\varepsilon}_p) = 0$). Cela vient du fait que lorsque des déformations plastiques locales entrent en jeu, un champ de déformation élastique est généré afin de tenir compte des incompatibilités plastiques.

3.3.3 Comportement élasto-plastique effectif incrémental

L'étape suivante consiste alors à développer le comportement élasto-plastique incrémental effectif. Les quantités recherchées sont donc $\partial \overline{\sigma}_{11}/\partial \overline{\varepsilon}_{11}$ et $\partial \overline{\sigma}_{22}/\partial \overline{\varepsilon}_{11}$. Leur expression dépendra du comportement élasto-plastique local de la phase. Dans ce qui suit, l'indice (*i*) indique qu'une quantité est évaluée dans la phase (*i*).

Tout d'abord, il est rappelé que l'incrément de déformation plastique axiale locale $\dot{\varepsilon}_{p,11}^{(i)}$ (lorsqu'il est non nul) peut être déduit de l'incrément la déformation totale locale $\dot{\varepsilon}_{11}^{(i)}$ par la relation (3.17)

$$\dot{\varepsilon}_{p,11}^{(i)} = \alpha^{(i)} \dot{\varepsilon}_{11}^{(i)}, \tag{3.34}$$

où $\alpha^{(i)}$ est défini par l'Equation (3.18). Ensuite, en utilisant la relation $\dot{\sigma}_{11}^{(1)} = \dot{\sigma}_{11}^{(2)}$, qui est valable pour un chargement quasi-statique, il est possible d'exprimer l'incrément de déformation totale local $\dot{\varepsilon}^{(i)}$ en fonction de l'incrément de déformation macroscopique totale $\dot{\overline{\varepsilon}}_{11}$ par la relation

$$\dot{\varepsilon}_{11}^{(i)} = \beta^{(i)} \dot{\overline{\varepsilon}}_{11}, \tag{3.35}$$

où les coefficients $\beta^{(i)}$, qui sont les composantes d'un tenseur de localisation de la déformation, restent à trouver.

Il est simple de noter que, à partir du système (3.32) dans sa forme incrémentale, et des Equations (3.31), (3.34) et (3.35), les expressions $\dot{\overline{\sigma}}_{11}$ et $\dot{\overline{\sigma}}_{22}$ ne dépendent que de $\dot{\overline{\varepsilon}}_{11}$ et $\dot{\varepsilon}_{p,11}^{(i)}$. A partir de ces relations, il est possible d'identifier les valeurs de $\partial \overline{\sigma}_{11}/\partial \overline{\varepsilon}_{11}$ et $\partial \overline{\sigma}_{22}/\partial \overline{\varepsilon}_{11}$, qui peuvent à leur tour être utilisées pour définir correctement l'équation d'advection. Ainsi, la détermination des conditions entraînant la plasticité locale ainsi que les valeurs des paramètres $\beta^{(i)}$ suffit à définir complètement le comportement élasto-plastique incrémental.

Plusieurs cas doivent être considérés, selon la phase qui plastifie (ou non). Tout d'abord, nous introduisons les quantités $\overline{\sigma}^{(+)}$ et $\overline{\sigma}^{(-)}$, qui correspondent aux valeurs de $\overline{\sigma}_{11}$ pour laquelle l'une des phases commence à atteindre la plasticité, lorsque $\dot{\overline{\epsilon}}_{11} > 0$ et $\dot{\overline{\epsilon}}_{11} < 0$, respectivement. Leurs expressions sont obtenues en exprimant le critère de plasticité (3.1) avec les contraintes locales données par (3.11) en notant que $\sigma_{11}^{(i)} = \bar{\sigma}_{11}$ (voir (B.12)) :

$$\begin{cases} \overline{\sigma}^{(+)} = \min_{(i)} \left(\frac{C_{1111}^{(i)}}{C_{1111}^{(i)} - C_{1122}^{(i)}} \left[\sigma_Y^{(i)} - \left(\frac{(C_{1122}^{(i)})^2}{C_{1111}^{(i)}} - \frac{C_{1111}^{(i)} + C_{1122}^{(i)}}{2} \right) \varepsilon_{p,11}^{(i)} \right] \right) \\ \overline{\sigma}^{(-)} = \max_{(i)} \left(\frac{C_{1111}^{(i)}}{C_{1111}^{(i)} - C_{1122}^{(i)}} \left[-\sigma_Y^{(i)} - \left(\frac{(C_{1122}^{(i)})^2}{C_{1111}^{(i)}} - \frac{C_{1111}^{(i)} + C_{1122}^{(i)}}{2} \right) \varepsilon_{p,11}^{(i)} \right] \right).$$
(3.36)

Avec $\overline{\sigma}^{(+)}$ et $\overline{\sigma}^{(-)}$, seul $\overline{\sigma}_{11}$ est en fait nécessaire pour évaluer si l'une des phases a commencé à plastifier. Cependant, pour suivre la forme du critère de plasticité locale, cette évaluation sera exprimée comme une condition sur $\overline{\sigma}_{11} - \overline{\sigma}_{22}$. L'étude de différents cas, dont les détails se trouvent dans l'Annexe B.2, conduit aux équations incrémentales suivantes ⁴ :

Si
$$\overline{\varepsilon}_{11} \ge 0$$
:
- Si $\overline{\sigma}_{11} - \overline{\sigma}_{22} \le \left(1 - \frac{\widetilde{C}_{1122}}{\widetilde{C}_{1111}}\right) \overline{\sigma}^{(+)} + \widetilde{\varepsilon}_{p,22} \left(\widetilde{C}_{2222} + \widetilde{C}_{2233} - \frac{2\widetilde{C}_{1122}^2}{\widetilde{C}_{1111}}\right)$:

$$\begin{cases} \dot{\varepsilon}_{p,11}^{(1)} = 0\\ \dot{\varepsilon}_{p,11}^{(2)} = 0. \end{cases}$$
(3.37)

- Si
$$\left(1 - \frac{\tilde{C}_{1122}}{\tilde{C}_{1111}}\right) \overline{\sigma}^{(+)} + \tilde{\varepsilon}_{p,22} \left(\tilde{C}_{2222} + \tilde{C}_{2233} - \frac{2\tilde{C}_{1122}^2}{\tilde{C}_{1111}}\right) < \overline{\sigma}_{11} - \overline{\sigma}_{22} < \langle \sigma_Y \rangle$$
:

$$\begin{cases} \dot{\varepsilon}_{p,11}^{(1)} = \alpha^{(1)} \dot{\varepsilon}_{11}^{(1)} = \alpha^{(1)} \beta^{(1)} \dot{\overline{\varepsilon}}_{11} \\ \dot{\varepsilon}_{p,11}^{(2)} = 0 \\ \beta^{(1)} = \left(f_1 + f_2 \frac{C_{1111}^{(1)} + \left(C_{1122}^{(1)} - C_{1111}^{(1)}\right) \alpha^{(1)}}{C_{1111}^{(2)}}\right)^{-1}. \tag{3.38}$$

• Si $\dot{\overline{\varepsilon}}_{11} < 0$:

^{4.} Les résultats sont présentés dans le cas où la phase (1) atteint la plasticité avant la phase (2) (les résultats pour la phase (2) plastifiant en premier s'obtient par échange d'indices).

- If
$$\overline{\sigma}_{11} - \overline{\sigma}_{22} \ge \left(1 - \frac{\widetilde{C}_{1122}}{\widetilde{C}_{1111}}\right) \overline{\sigma}^{(-)} + \widetilde{\varepsilon}_{p,22} \left(\widetilde{C}_{2222} + \widetilde{C}_{2233} - \frac{2\widetilde{C}_{1122}^2}{\widetilde{C}_{1111}}\right) :$$

$$\begin{cases} \dot{\varepsilon}_{p,11}^{(1)} = 0\\ \dot{\varepsilon}_{p,11}^{(2)} = 0. \end{cases}$$
(3.39)

- Si
$$\left(1 - \frac{\tilde{C}_{1122}}{\tilde{C}_{1111}}\right) \overline{\sigma}^{(-)} + \tilde{\varepsilon}_{p,22} \left(\tilde{C}_{2222} + \tilde{C}_{2233} - \frac{2\tilde{C}_{1122}^2}{\tilde{C}_{1111}}\right) > \overline{\sigma}_{11} - \overline{\sigma}_{22} > -\langle \sigma_Y \rangle :$$

$$\begin{cases} \dot{\varepsilon}_p^{(1)} = \alpha^{(1)} \dot{\varepsilon}_{11}^{(1)} = \alpha^{(1)} \beta^{(1)} \dot{\overline{\varepsilon}}_{11} \\ \dot{\varepsilon}_p^{(2)} = 0 \\ \beta^{(1)} = \left(f_1 + f_2 \frac{C_{1111}^{(1)} + \left(C_{1122}^{(1)} - C_{1111}^{(1)}\right) \alpha^{(1)}}{C_{1111}^{(2)}}\right)^{-1}. \end{cases}$$
(3.40)

• Si $\overline{\sigma}_{11} - \overline{\sigma}_{22} = \langle \sigma_Y \rangle$ (peu importe le signe de $\dot{\overline{\varepsilon}}_{11}$) :

$$\dot{\varepsilon}_{p,11}^{(1)} = \alpha^{(1)} \dot{\varepsilon}_{11}^{(1)} = \alpha^{(1)} \beta^{(1)} \dot{\overline{\varepsilon}}_{11}
\dot{\varepsilon}_{p,11}^{(2)} = \alpha^{(2)} \dot{\varepsilon}_{11}^{(2)} = \alpha^{(2)} \beta^{(2)} \dot{\overline{\varepsilon}}_{11}
\beta^{(1)} = \left(f_1 + f_2 \frac{C_{1111}^{(1)} + \left(C_{1122}^{(1)} - C_{1111}^{(1)} \right) \alpha^{(1)}}{C_{1111}^{(2)} + \left(C_{1122}^{(2)} - C_{1111}^{(2)} \right) \alpha^{(2)}} \right)^{-1}
\beta^{(2)} = \left(f_2 + f_1 \frac{C_{1111}^{(2)} + \left(C_{1122}^{(2)} - C_{1111}^{(2)} \right) \alpha^{(2)}}{C_{1111}^{(1)} + \left(C_{1122}^{(1)} - C_{1111}^{(1)} \right) \alpha^{(1)}} \right)^{-1}.$$
(3.41)

Il convient de noter que l'introduction de deux phases élastiques parfaitement plastiques aux propriétés différentes entraîne un comportement macroscopique présentant un écrouissage linéaire (cinématique) apparent. En effet, la plasticité locale dépend de la valeur de la contrainte macroscopique, ce qui amène les phases à atteindre la plasticité séparément. En particulier, chaque composante du tenseur des contraintes macroscopiques dépend linéairement (avec une pente qui dépend des propriétés locales du matériau) de la déformation axiale macroscopique lorsqu'une seule phase est plastique. Dans le cas où les deux phases locales ont atteint la plasticité, le comportement macroscopique devient élastique parfaitement plastique.

Le modèle élasto-plastique incrémental basé sur le MHE a été principalement développé pour prendre en compte l'effet de la microstructure sur les propriétés effectives. Cependant, il peut également être utilisé pour estimer les déformations plastiques locales dans les différentes phases. En effet, les déformations plastiques locales $\varepsilon_p^{(i)}$ sont des paramètres internes au modèle MHE puisqu'ils sont utilisés pour calculer les propriétés plastiques globales. De plus, leur équation d'évolution peut être directement liée à l'incrément de contrainte axiale macroscopique $\overline{\sigma}_{11}$:

$$\dot{\overline{\sigma}}_{11} = \left(\frac{C_{1111}^{(i)}}{\alpha^{(i)}} + C_{1122}^{(i)} - C_{1111}^{(i)}\right) \dot{\varepsilon}_{p,11}^{(i)}.$$
(3.42)

Le modèle basé sur le MHE, combiné à l'équation de propagation des ondes, peut donc être utilisé pour déterminer (approximativement) les déformations plastiques locales dans les phases sans avoir à recourir à des simulations en champ complet dans lesquelles les phases locales doivent être finement maillées. Dans l'Equation (3.42), l'incrément de la déformation plastique locale dépend uniquement de l'incrément de la contrainte axiale (qui est uniforme dans le stratifié) et des propriétés mécaniques de la phase choisie. Ainsi, le calcul de la déformation plastique locale n'est pas différent d'un cas homogène.

3.4 Simulation numérique de la propagation d'une onde de choc dans un matériau élasto-plastique laminé

3.4.1 Implémentation numérique

Les méthodes numériques utilisées pour résoudre l'équation de propagation des ondes élastoplastiques (3.13) vont maintenant être détaillées. Les méthodes de volumes finis sont un bon choix pour ce type de problème, car elles permettent l'utilisation d'une variété de schémas numériques adaptés aux équations hyperboliques [119]. Les domaines spatial et temporel sont discrétisés avec des incréments spatiaux et temporels constants, Δx and Δt respectivement. Dans les problèmes de propagation d'ondes non linéaires, les méthodes d'intégration temporelle explicites sont généralement préférées aux méthodes implicites car elles ne nécessitent pas d'opérations d'inversion de matrice. La stabilité numérique des méthodes explicites doit être assurée à l'aide de la condition de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL)

$$CFL = c_{\max} \frac{\Delta t}{\Delta x} \le 1.$$
(3.43)

L'Equation (3.43) assure qu'aucune information ne se propage en dehors du domaine numérique dans lequel l'équation est résolue. La quantité c_{\max} est la valeur maximale de la vitesse de l'onde axiale pour toutes les phases considérées. Ceci assure la validité de l'Equation (3.43) pour chaque cellule spatiale du domaine numérique. La valeur du nombre CFL est donc un paramètre d'entrée des simulations. L'incrément de temps Δt est ensuite déduit en utilisant la valeur de Δx choisi et les paramètres matériau des phases, ce qui permet le calcul de c_{\max} avec l'Equation (3.15).

La qualité des schémas numériques peut être évaluée par la quantité d'oscillations et de viscosité artificielles introduite dans la solution. Les schémas de type Godunov à haute résolution offrent de très bonnes performances car ils introduisent très peu d'oscillations et de viscosité artificielles. [84, 85, 118], par rapport à d'autres méthodes telles que le schéma de Lax-Wendroff, le schéma de Lax-Friedrichs (dont les détails peuvent être trouvés dans Leveque [118]), et le solveur éléments finis couplé à une intégration temporelle explicite [129, 140, 146, 147]. Le schéma de Godunov à haute résolution utilise notamment la décomposition spectrale de la matrice A de l'Equation (3.13) et un limiteur de flux (une fonction scalaire limitant l'amplitude des flux entrants et sortants à chaque cellule s'ils sont supérieurs à une certaine valeur). Ainsi, cette méthode n'ajoute qu'une petite quantité de viscosité artificielle localement là où cela est nécessaire, pour prévenir l'apparition d'oscillations artificielles. Quelques exemples illustratifs de plusieurs schémas numériques sont fournis dans l'Annexe A.

3.4.2 Description des simulations

Dans cette section, nous décrivons les simulations qui seront réalisées pour étudier l'effet de l'hétérogénéité microstructurale sur la propagation des ondes de contraintes élasto-plastiques. Afin de caractériser cet effet, plusieurs microstructures avec différents degrés d'hétérogénéité doivent être considérées. Nous considérerons plusieurs couples $(\kappa^{(1)}, \kappa^{(2)})$ and $(\mu^{(1)}, \mu^{(2)})$ définissant le tenseur des rigidités (3.4), menant aux *mêmes propriétés élastiques effectives* : ceci permet d'étudier le seul effet de l'hétérogénéité élastique (la limite d'élasticité étant supposée identique dans les deux phases). Trois cas numériques seront ainsi considérés :

- La microstructure hétérogène, comprenant de nombreuses couches isotropes élastiques parfaitement plastiques, résolue avec le schéma numérique en champ complet présenté ci-dessus.
- Le milieu équivalent homogénéisé (MHE) dont le comportement effectif est donné dans la procédure d'homogénéisation élasto-plastique incrémentale indiquée dans la Section 3.3.
- Une description homogène isotrope standard du matériau dans plusieurs cas : (i) avec les propriétés de la phase 1, (ii) avec les propriétés de la phase 2 et (iii) avec des propriétés élastiques et une limite d'élasticité similaires à celles du MHE.

Afin de caractériser le contraste mécanique au sein de la structure stratifiée considérée, nous devons disposer d'une mesure de la distance entre le comportement des deux phases. Cette mesure peut être effectuée en utilisant la distance log-Euclidienne pour les tenseurs, qui est invariante lors de l'inversion et convient donc aux tenseurs d'élasticité [130, 134]. Pour deux tenseurs d'élasticité isotropes (tels que considérés ici), on peut montrer que la distance log-Euclidienne, notée par d_{\ln} , s'écrit

$$d_{\rm ln} = \left\| \ln \left(\mathbb{C}^{(1)} \right) - \ln \left(\mathbb{C}^{(2)} \right) \right\| = \sqrt{\ln^2 \left(\frac{\kappa^{(1)}}{\kappa^{(2)}} \right) + 5\ln^2 \left(\frac{\mu^{(1)}}{\mu^{(2)}} \right)}.$$
(3.44)

Il est intéressant de constater que la distance entre les deux phases est directement liée au contraste entre les phases $\kappa^{(1)}/\kappa^{(2)}$ et $\mu^{(1)}/\mu^{(2)}$. Plusieurs cas seront étudiés, en gardant un des paramètres μ ou κ constant et en faisant varier l'autre, et pour différents contrastes de phases. Aucune variation de masse volumique ρ ne sera considérée par simplicité. Quant au comportement, il est pris similaire à celui d'un acier 12Cr, d'après Ballard [18]. Le choix de ce matériau permet d'utiliser la loi de Hooke pour le comportement élastique, au lieu d'une équation d'état, pour une pression appliquée inférieure à 13 GPa. Un résumé de tous les cas considérés est donné dans le Tableau 3.1. Tous les cas énumérés conduisent au même comportement élastique effectif défini par $\tilde{\mu} = 80.8$ GPa et $\tilde{\kappa} = 175$ GPa.

TABLE 3.1 – Valeurs des paramètres des matériaux considérés pour les simulations.

Cas test	$\kappa^{(1)}$ (GPa)	$\kappa^{(2)}$ (GPa)	$\mu^{(1)}$ (GPa)	$\mu^{(2)}$ (GPa)	$\rho~(\rm kg.m^{-3})$	σ_Y (MPa)	d_{\ln}
Homogène	175	175	80.8	80.8	7800	870	0
Cas avec μ non uniforme							
Cas test 1	193.9	158.3	80.8	80.8	7800	870	0.2
Cas test 2	204.3	150.8	80.8	80.8	7800	870	0.3
Cas test 3	215.0	143.8	80.8	80.8	7800	870	0.4
Cas test 4	226.5	137.3	80.8	80.8	7800	870	0.5
Cas avec κ non uniforme							
Cas test 5	175	175	84.5	77.1	7800	870	0.2
Cas test 6	175	175	86.3	75.4	7800	870	0.3
Cas test 7	175	175	88.1	73.7	7800	870	0.4
Cas test 8	175	175	90.0	71.9	7800	870	0.5

En plus du contenu original de l'article [112], quatre autres cas test sont ajoutés, où $\kappa^{(1)} = \kappa^{(2)} = \tilde{\kappa}$ et $\mu^{(1)} = \mu^{(2)} = \tilde{\mu}$, et les limites élastiques $\sigma_Y^{(1)}$ et $\sigma_Y^{(2)}$ de la phase 1 et de la phase 2 respectivement

varient, avec la contrainte que $\langle \sigma_Y \rangle = \tilde{\sigma}_Y = 870$ MPa. Ces nouveaux cas test sont résumés dans le Tableau 3.2 :

Cas test	κ (GPa)	μ (GPa)	$\rho~({\rm kg.m^{-3}})$	$\sigma_Y^{(1)}$ (MPa)	$\sigma_Y^{(2)}$ (MPa)	d_{\ln}
Homogène	175	80.8	7800	870	870	0
Cas test avec σ_Y non uniforme						
Cas test 9	175	80.8	7800	890	850	0
Cas test 10	175	80.8	7800	910	830	0
Cas test 11	175	80.8	7800	950	790	0
Cas test 12	175	80.8	7800	1030	710	0

TABLE 3.2 – Valeurs des paramètres des matériaux considérés pour les simulations supplémentaires.

Un domaine spatial de longueur L = 3.5 mm est considéré et est discrétisé avec 1800 cellules équidistantes, l'incrément spatial est donc d'environ $\Delta x = 1.94 \ \mu$ m. Un nombre CFL égal à 0.9 est utilisé pour toutes les simulations. La durée de la simulation est fixée à T = 570 ns, afin que les ondes de contraintes puissent se propager suffisamment longtemps pour être atténuées et ne plus induire de déformations plastiques, mais aussi pour qu'il n'y ait pas de réflexion au niveau du bord libre imposé à $x_1 = L$ (un second passage de l'onde avec un signe opposé modifierait éventuellement le champ de déformation plastique). Ainsi, tous les résultats pour les champs de déformation plastique seront présentés à l'instant t = T. Les conditions aux limites considérées sont les suivantes :

$$\sigma_{11}(0,t) = \begin{cases} P(t) \text{ if } t \le 200 \text{ns} \\ 0 \text{ if } t > 200 \text{ns} \end{cases}, \quad \sigma_{11}(L,t) = 0, \quad \begin{cases} v_1(x_1,0) = 0 \\ \sigma_{11}(x_1,0) = 0 \end{cases} \text{ for } 0 \le x_1 \le L, \qquad (3.45)$$

où P(t) est la pression appliquée produite par le choc laser dont le profil est représenté dans la Figure 3.1(b) (voir Peyre et al. [152]). L'amplitude choisie sera de 5 GPa et la durée temporelle du signal à mi-hauteur est d'environ 20 ns. Un bord libre est imposé à $x_1 = L$. Le nombre de couches est fixé à 300 sur la longueur du domaine, chaque couche a une épaisseur de 11,7 microns. Le nombre de cellules spatiales par couche est fixé à 6. Ce nombre de couches garantit que l'onde de contrainte se propage à travers un nombre suffisant de couches. En considérant la vitesse dans l'échantillon homogène dans la direction axiale, l'onde de contrainte se propage sur 10 couches pendant la durée de l'impulsion.

3.4.2.1 Simulation de la propagation de l'onde de contrainte

Cette sous-section est un ajout à l'article publié.

Dans cette section, le modèle hétérogène 1D pour la propagation des ondes de contrainte est présenté, afin d'évaluer comment cet aspect particulier est affecté par la nature stratifiée du spécimen. La Figure 3.3 présente des instants de la propagation de la contrainte axiale σ_{11} . Seuls les résultats des cas test présentant les plus forts contrastes entre les propriétés sont présentés, afin de rendre les observations plus claires. Les résultats pour le matériau homogène ont été ajoutés pour mettre en évidence les différences induites par la nature hétérogène de l'échantillon. La Figure 3.4 présente un zoom afin de mieux observer le comportement des précurseurs élastiques.



FIGURE 3.3 – Instants de la propagation de l'onde de contrainte axiale σ_{11} pour les cas de test avec les plus grands contrastes entre les phases. (a) Propagation à t = 110 ns (b) Propagation à t = 270 ns (c) Propagation à t = 405 ns (d) Propagation à t = 540 ns.



FIGURE 3.4 – Propagation de l'onde de contrainte axiale σ_{11} pour les cas test avec les plus grands contrastes entre les phases, à t = 110 ns, zoom afin de mieux observer les précurseurs élastiques.

Plusieurs commentaires s'imposent concernant les résultats de la Figure 3.3. Chaque matériau stratifié pour les cas test 4, 8 et 12 est construit de manière à ce que son comportement élastique effectif soit le même. Les fronts de charge de chaque résultat sont donc superposés (puisque la vitesse de l'onde de contrainte élastique effective est la même pour chaque matériau). Cependant, les similitudes s'arrêtent là, car le comportement plastique est différent pour chaque cas test, et globalement différent du comportement homogène de référence. Dans ce dernier, le début de la plasticité est marqué par un plateau, appelé précurseur élastique. Puisque les ondes de contrainte élastique sont plus rapides que les ondes de contrainte plastiques, la partie avant de l'onde restant élastique se propage plus rapidement que le reste, créant ainsi ce précurseur. La valeur de la contrainte axiale du précurseur correspond à la limite élastique de Hugoniot (Hugoniot Elastic Limit, HEL) σ_{HEL} , donnée par

$$\sigma_{\rm HEL} = \sigma_Y \left(\frac{2}{3} + \frac{\kappa}{2\mu}\right). \tag{3.46}$$

Cependant, alors que le matériau homogène présente un seul précurseur élastique, les matériaux hétérogènes en ont deux (cf. Figure 3.3(a)). Dans ce cas, le premier précurseur correspond au début de la plasticité dans la phase avec la plus faible valeur de limite d'Hugoniot σ_{HEL} . Le second précurseur correspond à la valeur de la contrainte axiale nécessaire pour que les deux phases atteignent la plasticité. Progressivement, l'onde de contrainte s'atténue jusqu'à la valeur la plus faible de σ_{HEL} après laquelle les ondes de contrainte restent élastiques. Comme cette valeur est différente pour tous les cas test, l'amplitude finale des ondes de contrainte est différente (cf. Figure 3.3). Un dernier commentaire concerne la présence d'oscillations dans les solutions dues *en partie* aux différences d'impédance entre les phases, dans les cas d'essai 4 et 8 mais pas dans le cas d'essai 12. Ces oscillations sont causées par les ondes réfléchies et transmises à chaque interface. Wang [190] définit les coefficients de réflexion et de transmission F et T respectivement par :

$$\begin{cases}
F = \frac{1-n}{1+n} \\
T = \frac{2}{1+n} \\
n = \frac{\rho^{(1)}c^{(1)}}{\rho^{(2)}c^{(2)}}
\end{cases}$$
(3.47)

Dans tous les cas test, puisque $\rho^{(1)} = \rho^{(2)}$, nous avons $n = C_{1111}^{(1)}/C_{1111}^{(2)}$. Par ailleurs, pour le cas test 12, n = 1 et il n'y a pas d'onde réfléchie. Dans le cas où $C_{1111}^{(1)} > C_{1111}^{(2)}$, le ratio n est plus important dans le cas test 4 que dans le cas test 8. Le coefficient F augmente, en valeur absolue, à mesure que naugmente. Ici, les rapports des coefficients F and T entre les cas test 4 et 8 sont respectivement de 3.63 et 0.94. Ainsi, dans cette configuration, les ondes réfléchies ont une amplitude plus élevée dans le cas test 4 que dans le cas test 8. D'où les oscillations plus élevées pour le cas test 4 où seuls le coefficient κ varie. Cependant, d'après les Figures 3.3(a) à 3.3(c), l'amplitude de ces oscillations augmente, comme si le système commençait à résonner. Cette résonance pourrait être d'origine numérique, et pourrait influencer les résultats pour des temps de simulation longs. Les oscillations ont également une origine « plastique », puisqu'il est possible d'en observer dans le cas test 12, mais si elles y sont ténues. En effet, dans chacun des cas présentés, la contrainte axiale limite au delà de laquelle de la plasticité est induite est différente entre les deux phases. Lorsqu'une onde se propageant de manière purement élastique traverse une interface au delà de laquelle elle introduit de la déformation plastique, elle perd alors de la vitesse et est atténuée. Ce changement est alors suffisant pour introduire une onde réfléchie, même dans le cas où les propriétés élastiques entre les deux phases sont identiques. Cette analyse est valable pour une onde se propageant de manière plastique entre deux phases de propriétés différentes. Ces deux phénomènes sont donc à l'oeuvre dans l'origine des oscillations de la Figure 3.3.

3.4.2.2 Simulation du champ de déformation plastique axiale

Commençons par un exemple illustratif qui permettra comprendre l'effet de l'hétérogénéité du matériau sur les champs mécaniques. Le profil de déformation plastique axial est représenté sur la Figure 3.5 à la fin de la simulation, pour le cas test 1, ainsi que les solutions pour deux matériaux homogènes, respectivement avec les propriétés des phases 1 et 2 du cas test 1. Ce dernier point vise à illustrer comment la réponse d'une microstructure hétérogène est différente de celle d'un matériau homogène. Le profil de déformation plastique pour l'éprouvette stratifiée est typique de ce qui peut être obtenu avec le modèle de champ complet. En particulier, le profil présente de fortes variations dont les longueurs correspondent à l'épaisseur des couches, correspondant à des discontinuités d'une phase à l'autre. Ce profil de déformation plastique « oscillatoire » est donc une conséquence du comportement élastique hétérogène du stratifié. Lorsqu'on le compare à la réponse des deux spécimens homogènes, il apparaît clairement qu'une description hétérogène change radicalement le comportement du spécimen. A l'exception de la partie initiale des profils ($x_1 \leq 0.4$ mm, approximativement), les comportements des phases ne sont ni des limites pour les variations de la solution de champ complet, ni une correspondance correcte pour la profondeur affectée, c'est-à-dire la profondeur jusqu'à laquelle les déformations plastiques sont non nulles. Ceci est dû au fait que l'onde de choc est amortie lors de la plastification de l'éprouvette, et au fait qu'une interaction mécanique se produit entre les deux phases dans le laminé,

modifiant l'état de contrainte local. Cependant, à un certain point du stratifié, la valeur de l'onde de choc n'est pas assez élevée pour plastifier l'une des phases. Elle n'est alors amortie que dans une seule d'entre elles (l'autre se comportant de manière élastique), ce qui lui permet de se déplacer plus loin sans être complètement atténuée jusqu'à la plus petite valeur nécessaire pour plastifier au moins une phase. Dans les cas homogènes, l'onde est continuellement atténuée, d'où une profondeur affectée plus faible.

Puisque la réponse de l'échantillon hétérogène montre un comportement oscillatoire, l'étude de son comportement moyen est également intéressante pour caractériser l'effet de l'hétérogénéité. Ce comportement moyen peut être calculé à partir du profil oscillatoire complet, en post-traitement, en faisant la moyenne des valeurs aux interfaces des couches. L'amplitude des variations de la déformation plastique est également calculée à partir de la réponse montrée dans la Figure 3.5. Le comportement moyen associé ainsi que l'amplitude des variations obtenus en post-traitement sont représentés dans la Figure 3.6 à des fins d'illustration.



FIGURE 3.5 – Comparaison des profils de déformation plastique pour le cas hétérogène et le cas homogène avec des propriétés élastiques $(\kappa^{(1)}, \mu^{(1)})$ et le cas homogène avec des propriétés élastiques $(\kappa^{(2)}, \mu^{(2)})$. (a) Représentation dans tout le domaine spatial. (b) Vue agrandie pour montrer la nature oscillatoire du profil dans l'échantillon stratifié.



FIGURE 3.6 – Distribution des profils de comportement et d'amplitude moyens post-traités calculés à partir de la solution de champ complet du stratifié dans le cas test 1.

L'influence des paramètres des matériaux $\kappa^{(1)}$, $\kappa^{(2)}$, $\mu^{(1)}$, $\mu^{(2)}$, $\sigma_Y^{(1)}$ et $\sigma_Y^{(2)}$ sur le comportement moyen de la déformation plastique et sur l'amplitude des variations sont maintenant étudiées et présentées dans les Figures 3.7, 3.8 et 3.9. Dans le cas du comportement moyen, les comparaisons incluront le matériau homogène (avec des propriétés élastiques $\tilde{\mu} = 80.8$ GPa, $\tilde{\kappa} = 175$ GPa et $\tilde{\sigma}_Y = 870$ MPa), qui ne présente pas de variations dans la solution, afin de souligner comment les comportements s'en écartent.



FIGURE 3.7 – Influence de l'hétérogénéité des modules $\kappa^{(i)}$ (avec le coefficient μ constant) sur la distribution de la déformation plastique (cas 1 à 4). (a) Déformations plastiques moyennes. (b) Amplitude des variations du champ de déformation plastique.



FIGURE 3.8 – Influence de l'hétérogénéité des modules $\mu^{(i)}$ (avec le coefficient coefficient κ constant) sur la distribution de la déformation plastique (cas 5 à 8). (a) Déformations plastiques moyennes. (b) Amplitude des variations du champ de déformation plastique.



FIGURE 3.9 – Influence de l'hétérogénéité de la limite élastique $\sigma_Y^{(i)}$ (avec les coefficients κ et μ constants) sur la distribution de la déformation plastique (cas 5 à 8). (a) Déformations plastiques moyennes. (b) Amplitude des variations du champ de déformation plastique.

Les résultats des Figures 3.7a, 3.8a et 3.9a montrent que le comportement moyen de tous les cas test diffère significativement de l'éprouvette homogène, même pour une petite valeur du contraste élastique, indiquant la présence d'un durcissement apparent. Plus précisément, dans tous les cas, les comportements moyens correspondent dans un premier temps à l'éprouvette homogène, mais des différences sont observées à des profondeurs $x_1 \ge 1$ mm, ce qui entraîne une plus grande profondeur affectée par les déformations plastiques. Cependant, cette nouvelle profondeur affectée ne semble pas varier avec les paramètres élastiques. Lorsqu'une onde de contrainte plastique se propage à travers l'échantillon, elle est progressivement atténuée jusqu'à ce que son amplitude ne soit plus suffisamment élevée pour que la plasticité soit active. Le fait que la profondeur affectée ne varie pas avec le contraste élastique indique que les ondes de contrainte atteignent la même distance avant d'être complètement atténuées jusqu'à la valeur la plus faible de la contrainte axiale permettant aux phases de plastifier.

Quant aux amplitudes des variations des figures 3.7b, 3.8b et 3.9b, elles augmentent avec le contraste élastique entre les phases. Lorsque ce dernier augmente, la quantité de plasticité induite dans la phase ayant la plus grande valeur de κ , μ ou σ_Y décroîtra, puisque cette phase devient plus rigide, alors qu'elle augmentera dans l'autre, ce qui entraîne une augmentation de l'amplitude des variations.

L'influence de la structure laminée du matériau a été observée dans les solutions en champ complet pour la contrainte axiale et les déformations plastiques axiales. Nous allons maintenant étudier les résultats du modèle MHE pour les mêmes paramètres.

3.4.3 Propagation de l'onde de contrainte axiale estimée par le modèle MHE

Cette sous-section est un ajout à l'article publié.

Maintenant que les résultats en champs complets ont été présentés, il est possible d'évaluer les performances du modèle MHE. La Figure 3.10 présente des instants de la propagation des ondes de contrainte axiale séparément pour les cas test 4, 8 et 12, avec une comparaison entre la solution en champ complet et la solution MHE.



FIGURE 3.10 – Instants de la propagation des ondes de contrainte axiale obtenus avec le modèle en champ complet et le modèle MHE. (a) Cas test 4 à t = 110 ns, (b) Cas test 4 à t = 540 ns, (c) Cas test 8 à t = 110 ns, (d) Cas test 8 à t = 540 ns, (e) Cas test 12 à t = 110 ns, (f) Cas test 12 à t = 540 ns.

Les résultats présentés dans la Figure 3.10 montrent que le modèle MHE est parfaitement capable de représenter la majorité de l'influence de la structure hétérogène visible dans la solution en champ complet. Notamment, les doubles précurseurs présents dans les différents cas test (et plus visiblement dans les cas de test 8 et 12, cf figures 3.10(c) et 3.10(e)). De plus, l'amplitude finale de l'onde de contrainte ainsi que sa forme sont parfaitement capturées. Cependant, en particulier pour le cas test 4, les oscillations ne peuvent pas être reproduites, puisque le modèle MHE n'a pas d'interfaces avec des propriétés mécaniques différentes. On peut noter que le résultat homogénéisé semble être les valeurs moyennes des variations dans ce cas. Ainsi, la Figure 3.10 montre que le MHE est parfaitement capable de modéliser la propagation des ondes de contrainte dans un matériau stratifiée.

3.4.4 Hétérogénéité des champs locaux de déformation plastique estimée par le modèle MHE

Les résultats en déformation plastique obtenu grâce au modèle MHE développé dans Section 3.3.3 vont maintenant être présentés. Comme expliqué dans cette section, le modèle basé sur MHE contient plusieurs paramètres internes impliqués dans la définition des champs macroscopiques. En particulier, le champ de déformation plastique local est connu et se réduit aux seules variables suivantes $\varepsilon_{p,11}^{(1)}$ et $\varepsilon_{p,11}^{(2)}$ puisque le champ de déformation plastique local est uniforme dans les deux phases. Ainsi, dans les simulations réalisées avec le modèle basé sur le MHE, la déformation plastique locale à chaque nœud du domaine dans les deux phases peuvent être estimée. Comme indiqué dans la Section 3.3, cette estimation repose sur l'hypothèse que le stratifié est soumis à des conditions aux limites macroscopiquement homogènes, à chaque nœud du domaine.

Nous allons maintenant comparer ces déformations plastiques par phase calculées à partir du modèle MHE avec la déformation plastique locale obtenue avec la procédure en champ complet. Les profils de déformation plastique sont comparés dans la Figure 3.11 pour les cas test 1 et 5, dans la Figure 3.12 pour les cas test 4 et 8 et dans la Figure 3.13 pour les cas test 9 et 12.



FIGURE 3.11 – Superposition du profil de déformation plastique en champ complet et de la déformation plastique locale obtenue à l'aide du MHE. (a) Cas test 1 et (b) cas test 5.



FIGURE 3.12 – Superposition du profil de déformation plastique en champ complet et de la déformation plastique locale obtenue à l'aide du MHE. (a) Cas test 4 et (b) Cas test 8.



FIGURE 3.13 – Superposition du profil de déformation plastique en champ complet et de la déformation plastique locale obtenue à l'aide du MHE. (a) Cas test 9 et (b) Cas test 12.

Il est remarquable de constater que les profils de déformation plastique dans les phases déterminés à partir du modèle MHE, définissent presque parfaitement l'enveloppe des variations de la déformation plastique obtenue avec la procédure en champ complet de référence. On peut également remarquer que les profils de déformation plastique pour les phases 1 et 2 ne présentent pas le même comportement lorsque κ , μ ou σ_Y est constant : les phases présentant les valeurs de déformation plastique les plus élevées sont permutées entre les deux profils de la Figure 3.11(b) et des Figures 3.12(b) et 3.13b une fois que la contrainte plastique cesse de saturer (et commence à diminuer). Cette caractéristique est en accord avec les résultats de la solution plein champ pour laquelle ce « croisement » est également observé (comme montré par la diminution soudaine de l'amplitude de la déformation plastique dans la Figure 3.8(b) à $x_1 \simeq 0.3$ mm). Ces résultats impliquent que le modèle basé sur le MHE réussit à reproduire l'amplitude des variations.

3.4.5 Champ moyen des déformations plastique estimé par le modèle MHE

Le modèle MHE permet de calculer la déformation plastique axiale effective $\tilde{\varepsilon}_{p,11}$. Toutefois, comme indiqué dans la Section 3.3.3, la déformation plastique axiale effective $\tilde{\varepsilon}_{p,11}$ n'est pas égale à la déformation plastique axiale moyenne définie par $\langle \varepsilon_{p,11} \rangle$. En revanche, dans les simulations en champ complet, c'est la quantité $\langle \varepsilon_{p,11} \rangle$ qui est calculée à partir de l'enveloppe des variations et affichée dans la Figure 3.7(a), Figure 3.8(a) et Figure 3.9(a). Ainsi, pour évaluer plus avant les performances du modèle basé sur le MHE, la déformation plastique axiale moyenne sera considéré à la place de la déformation plastique axiale effective pour la comparaison avec la solution en champ complet. On peut également remarquer que, à titre indicatif, dans les cas considérés, l'écart entre la déformation plastique moyenne et la déformation plastique effective prédite par le modèle MHE est toujours inférieur à 3,7 %. Cependant, dans les cas d'essai 9 à 12, les propriétés élastiques étant homogènes, la déformation plastique axiale effective est égale à la déformation plastique axiale moyenne.

Les profils de la déformation plastique moyenne sont représentés dans la Figure 3.14 pour les cas test 1 et 5 (tout deux avec $d_{\rm ln} = 0.2$), dans la Figure 3.15 pour les cas test 4 et 8 (tout deux avec $d_{\rm ln} = 0.4$) et dans la Figure 3.16 pour les cas test 9 et 12.



FIGURE 3.14 – Comparaison entre la déformation plastique moyenne du modèle basé sur MHE et la déformation plastique moyenne de la solution de référence en champ complet pour $d_{\rm ln} = 0.2$. (a) Cas test 1 et (b) Cas test 5.



FIGURE 3.15 – Comparaison entre la déformation plastique moyenne du modèle basé sur le MHE et la déformation plastique moyenne de la solution en champ complet pour $d_{\rm ln} = 0.4$. (a) cas test 4 et (b) Cas test 8.



FIGURE 3.16 – Comparaison entre la déformation plastique moyenne du modèle basé sur le MHE et la déformation plastique moyenne de la solution en champ complet pour $d_{\rm ln} = 0$. (a) Cas test 9 et (b) Cas test 12.

D'après les Figures 3.14, 3.15 et 3.16 il apparaît un bon accord entre la déformation plastique moyenne du modèle basé sur le MHE et la déformation plastique moyenne calculée en utilisant l'approche numérique plein champ. En considérant l'hétérogénéité de la microstructure, la profondeur affectée par le LSP, dans laquelle la déformation plastique se produit, est environ deux fois plus grande que celle prédite par l'approche standard dans laquelle l'échantillon est supposé être homogène. La comparaison avec le comportement homogène illustre l'impact important des hétérogénéités mécaniques. Les Figure 3.14, Figure 3.15 et Figure 3.16 montrent que l'utilisation du modèle MHE, qui est composé de trois domaines d'évolution (les deux phases sont élastiques, l'une est plastique et les deux sont plastiques), chacun avec une loi incrémentale associée, permet de reproduire, en moyenne, la solution correcte fournie par la procédure en champ complet avec une bonne précision. En particulier, la comparaison tient particulièrement bien dans le cas où κ et σ_Y restent constantes entre les phases (Figures 3.14(b), 3.15(b) et 3.16), qui est lié au faible niveau de l'amplitude des variations comme le montre la Figure 3.8(b).

Dans les Figures 3.14 et 3.15, et particulièrement dans les Figures 3.14(a) et 3.15(a), la profondeur affectée prédite par le modèle MHE est légèrement inférieure à la profondeur affectée prévue par la procédure de référence en champ complet. Cette différence peut être liée à la présence de réflexions de l'onde de contrainte dans le spécimen stratifié en raison du décalage d'impédance qui sont absentes dans le modèle MHE. Dans la solution en champ complet, après un certain temps, l'onde de contrainte est amortie à la plus petite valeur de contrainte axiale nécessaire pour déclencher la plasticité dans au moins une phase. Cependant, à cause des réflexions, cette valeur peut être légèrement dépassée, induisant ainsi une petite quantité de déformation plastique à une profondeur où l'onde de contrainte dans le modèle MHE a été suffisamment atténuée pour ne pas générer de déformation plastique.

3.4.6 Commentaires sur les conditions de chargement

Il convient de noter que, dans les simulations, la contrainte maximale appliquée était égale à 5 GPa, qui est toujours supérieure à $2\sigma_{\text{HEL}}$. Ainsi, pour cette pression appliquée, la déformation plastique sature (dans la première partie du domaine), comme on peut l'observer sous la forme d'un « plateau » sur les Figures 3.5, 3.6, 3.7, 3.8, 3.14 and 3.15. Comme expliqué dans Ballard [18], dans un matériau homogène et isotrope, la déformation plastique dans ces parties ne dépend pas de l'amplitude P de la pression mais seulement sur les paramètres du matériau. Les hypothèses conduisant à la démonstration de l'expression de cette déformation plastique saturée sont également valables à l'échelle locale dans les modèles en champ complet et MHE, puisque les phases locales sont homogènes isotropes, avec une plasticité incompressible. On peut donc notamment montrer que, si la pression a une amplitude supérieure à $2\sigma_{\text{HEL}}$ (ce qui est le cas ici), la valeur du plateau de saturation des phases, notée par ε_p^{max} est donnée par

$$\varepsilon_p^{\max,(i)} = \frac{2C_{1111}^{(i)}\sigma_Y^{(i)}}{\left(C_{1111}^{(i)} - C_{1122}^{(i)}\right)\left(C_{1111}^{(i)} + 2C_{1122}^{(i)}\right)} = \frac{1}{3}\left(\frac{1}{\mu^{(i)}} + \frac{4}{3\kappa^{(i)}}\right)\sigma_Y^{(i)}.$$
(3.48)

La validité de l'Equation (3.48) pour la déformation plastique locale calculée par le modèle MHE peut être vérifiée dans la Figure 3.11 et dans la Figure 3.12. Sa validité pour un cas homogène ou hétérogène est également vérifiée numériquement par le fait que les plateaux de saturation sont identiques entre la solution hétérogène en champ complet et les solutions homogènes de la Figure 3.5. Ainsi, lorsque la valeur de κ ou μ augmente, la valeur de ε_p^{max} diminue, comme vérifié dans les Figures 3.12(a) et 3.12(b). Il est également intéressant de remarquer que, lorsque σ_{HEL} diminue, la profondeur affectée augmente. La profondeur affectée devrait donc augmenter lorsque κ diminue ou quand μ augmente, comme cela est également vérifié dans les Figures 3.12(a) et 3.12(b).

Ce raisonnement peut également être appliqué au cas où seul σ_Y varie (cf Figure 3.13). σ_{HEL} et $\varepsilon_p^{\max,(i)}$ augmentent lorsque σ_Y augmente. La déformation plastique saturée est donc plus élevée pour la phase où la limite d'élasticité est la plus élevée, mais la déformation plastique axiale diminue plus rapidement dans cette phase puisque l'onde de contrainte est rapidement atténuée.

Le choix de l'amplitude de chargement P est ici arbitraire, et une valeur inférieure au seuil $2\sigma_{\text{HEL}}$ aurait donné des profils de déformation plastique différents, sans toutefois changer les conclusions tirées de l'étude, concernant la profondeur affectée, les profils de la déformation plastique moyenne de la solution en champ complet, et l'augmentation des amplitudes avec le contraste élastique.

3.5 Discussion

Les simulations numériques d'un choc laser se propageant dans une éprouvette hétérogène ont permis de montrer des caractéristiques intéressantes sur la déformation plastique résiduelle liée à l'hétérogénéité des propriétés élastiques entre les phases. En effet, le profil de déformation plastique présente des discontinuités aux interfaces des phases. De ce profil, la déformation plastique moyenne et l'amplitude de ses variations ont été extraites afin de caractériser l'effet du contraste du comportement élastique entre les deux phases. Une augmentation du contraste élastique conduit à une augmentation de l'amplitude des variations et modifie la distribution des déformations plastiques. Dans le cas du LSP, le profil de déformation plastique induit par la propagation des ondes élasto-plastiques entraîne

3.5. DISCUSSION

l'apparition de contraintes résiduelles qui sont censées augmenter la résistance à la fatigue. Ainsi, l'hétérogénéité du profil de déformation plastique décrit dans ce travail peut avoir des conséquences importantes sur la résistance à la fatigue car il induit des contraintes résiduelles hétérogènes à l'échelle des composants individuels de la microstructure.

L'effet de l'hétérogénéité a également été étudié à l'aide d'un modèle basé sur MHE tenant compte de la microstructure hétérogène. Une homogénéisation élasto-plastique quasi-statique a été réalisée et a conduit à un comportement élasto-plastique macroscopique avec des paramètres internes décrivant les conditions locales de plasticité des phases. Pour chaque domaine, des lois incrémentales sont calculées, afin de permettre le calcul de la propagation de l'onde de contrainte ainsi que la mise à jour des variables internes. En conséquence, le résultat du modèle est le comportement plastique moyen de la microstructure mais aussi une estimation des déformations plastiques locales dans les phases. Les prédictions du modèle MHE ont été comparées aux résultats numériques de référence fournis par la procédure en champ complet et un très bon accord a été observé : le modèle MHE capture très précisément le profil plastique moyen ainsi que l'enveloppe des amplitudes des variations. De tels résultats ont des conséquences prometteuses en termes de coûts de calcul. En effet, le principal inconvénient des simulations en champ complet est qu'elles nécessitent une discrétisation spatiale très fine afin de décrire chaque couche. Ainsi, pour un grand échantillon avec de petites hétérogénéités, le temps de calcul peut devenir prohibitif. En revanche, le modèle MHE ne nécessite pas un maillage particulièrement fin et peut être une alternative intéressante pour estimer la fluctuation de la déformation plastique dans des spécimens hétérogènes soumis à un choc laser. Plus généralement, une telle approche permettra de tenir compte de la microstructure spécifique de l'échantillon métallique traité par LSP, telle que la forme moyenne des grains et la texture cristallographique, et du comportement élasto-visco-plastique anisotrope associé. Ceci nécessite l'utilisation d'un modèle d'homogénéisation adapté à de telles microstructures, comme dans [25, 42, 80]. Il est donc possible d'approximer correctement les caractéristiques de la solution en champ complet avec un modèle MHE nécessitant beaucoup moins de temps de calcul. A titre indicatif, pour le cas test 4 du Tableau 3.1, le temps requis par le modèle MHE est environ cinq fois inférieur au temps requis par la simulation plein champ pour obtenir des résultats comparables. Une étude plus approfondie est cependant nécessaire pour tirer des conclusions définitives. Le temps de calcul minimum requis par le modèle plein champ pour obtenir des résultats convergents dépend du nombre de couches, puisque chaque couche doit être maillée assez finement. Ainsi, le temps de calcul gagné par l'utilisation du modèle MHE dépend du nombre de couches de la microstructure, et devrait augmenter avec le nombre de couches. Les propriétés mécaniques influencent également les ressources de calcul nécessaires, puisque l'équation (3.43) doit être vérifiée. Cela signifie que pour un Δx et un nombre CFL fixé, plus la vitesse élastique est élevée, plus l'incrément de temps sera faible, et le calcul nécessitera donc plus d'incréments pour se terminer.

Enfin, nous voulons également souligner que les résultats obtenus avec le modèle basé sur le MHE ne sont valables que pour des hétérogénéités avec une petite taille caractéristique par rapport à la longueur d'onde de la charge dynamique, comme expliqué dans Capdeville et al. [40]. En effet, pour les couches épaisses, remplacer l'éprouvette comportant un petit nombre de couches épaisses par son modèle effectif équivalent n'est pas une procédure valable. Pour illustrer cela, considérons à nouveau le cas test 4 du Tableau 3.1, avec les mêmes paramètres de simulation que dans les simulations précédentes mais seulement 20 couches sont considérées, leur épaisseur est donc maintenant de 0.175 mm. La distribution de la déformation plastique, représentée sur la Figure 3.17 montre que les résultats du modèle MHE ne correspondent pas à la solution de référence en champ complet, en raison du faible nombre de couches. La difficulté découlant d'une telle observation est d'identifier clairement le nombre de couches, pour un chargement et un matériau donnés, au-delà duquel on peut utiliser de manière pertinente le modèle MHE pour approximer le comportement en champ complet.



FIGURE 3.17 – Profils de déformation plastique pour le modèle en champ complet et le modèle MHE dans le cas de couches épaisses.

À titre indicatif, différentes simulations du cas test 4 mais avec des nombres de couches différents montrent que la différence globale entre la déformation plastique moyenne calculée avec le modèle plein champ et le modèle MHE atteint sa valeur la plus basse pour un nombre de couches supérieur à 250. Nous soulignons qu'une étude plus approfondie est nécessaire pour tirer des conclusions définitives.

3.6 Conclusion

Le travail présenté dans ce chapitre visait à fournir une modélisation améliorée d'un impact laser sur un spécimen métallique, en prenant en compte la microstructure du spécimen. Le cas simplifié d'une microstructure stratifiée soumise à un état de contrainte uniaxial a été considéré. La microstructure était composée de deux phases alternant périodiquement et parfaitement liées entre elles. Suivant ces hypothèses, la propagation des ondes de contrainte a été modélisée par un système d'EDP hyperbolique, résolu en utilisant un schéma de Godunov à haute résolution. Pour mieux décrire l'effet de la microstructure du stratifié sur la propagation des ondes de contrainte, mais à un coût numérique moindre, un modèle élasto-plastique basé sur MHE a été développé. Il s'avère que ce modèle MHE est capable de reproduire précisément la distribution spatiale de la déformation plastique moyenne à l'intérieur du spécimen par rapport à la solution numérique plein champ de référence, à condition que le nombre de couches soit suffisamment élevé. Plus particulièrement, ce modèle élasto-plastique basé sur le MHE permet de calculer les déformations plastiques locales dans les phases (sans toutefois connaître leur position précise dans l'échantillon), ce qui permet d'estimer l'ampleur des hétérogénéités de déformation plastique résiduelles. L'avantage du modèle MHE est qu'il permet de diminuer le temps de calcul puisqu'il ne nécessite pas de mailler finement chaque couche, contrairement à l'approche plein champ. Avec ce modèle simplifié, le gain en temps CPU est d'un facteur 6 environ mais il peut augmenter de manière significative pour des cas 2D ou même 3D avec des microstructures plus complexes telles que celles des matériaux polycristallins [63, 159].

Les résultats constituent un premier pas vers la simulation de micro-LSP, pour lesquels l'effet de

l'hétérogénéité de la microstructure devrait être important. D'autres développements sont nécessaires dans les directions suivantes :

- Seules deux phases différentes ont été considérées pour le spécimen de stratifié. Il serait intéressant d'étendre les développements à un nombre plus grand de phases.
- Une validation expérimentale des résultats est nécessaire pour évaluer correctement l'effet de la microstructure sur la déformation plastique résiduelle. Les spécimens métalliques co-laminés produits par Accumulative Roll Bonding (ARB) seraient de bons candidats pour évaluer le modèle car le nombre et l'épaisseur des couches peuvent être finement contrôlés. [187].
- Les travaux actuels ouvrent la voie à d'autres développements, notamment une description de la microstructure d'un agrégat polycristallin comprenant des grains anisotropes avec des orientations différentes, ce qui entraîne des propriétés matérielles différentes le long de la direction du choc. Contrairement à ce travail, ces microstructures auraient également une certaine nature aléatoire.
- L'extension du présent travail à un cas 2D ou 3D (par exemple avec une microstructure polycristalline) est nécessaire afin de fournir des distributions de contraintes résiduelles qui sont intéressantes pour étudier l'augmentation possible de la durée de vie en fatigue après un écrouissage par choc laser.

Chapitre 4

Modélisation et simulation de la propagation d'une onde de contrainte et des contraintes résiduelles en plasticité cristalline

Contenu

4.1	Introduction					
4.2	Modèle	e de polycristal				
	4.2.1	Modélisation géométrique d'un polycristal				
	4.2.2	Comportement élastique d'un grain				
	4.2.3	Description du comportement plastique				
4.3	Modéli	sation en deux dimensions de la propagation d'une onde de contrainte élasto-				
	plastiq	ue				
	4.3.1	Modélisation en déformation plane				
	4.3.2	Équation de propagation d'une onde de contrainte en deux dimensions 119				
	4.3.3	Méthodes numériques pour la simulation de la propagation d'une onde de contraintes en deux dimensions				
	4.3.4	Traitement numérique de la plasticité cristalline				
4.4	Calcul	numérique des contraintes résiduelles				
4.5	Micros	tructures simples : cas d'un monocristal et d'un bicristal				
	4.5.1	Cas d'un monocristal				
	4.5.2	Cas d'un bicristal				
4.6	Déforn	nations plastiques et contraintes résiduelles induites par choc laser dans un				
	polycri	istal				
	4.6.1	Effet de la microstructure				
	4.6.2	Approche statistique des simulations en plasticité cristalline				
	4.6.3	Influence de la taille moyenne des grains				
4.7	Conclusion					

4.1. INTRODUCTION

Ce chapitre suit la même méthodologie générale que le Chapitre 3. Maintenant que l'influence d'une microstructure hétérogène a été étudiée sur le cas d'un laminé, nous appliquons la méthode au cas d'une microstructure plus représentative de celle d'un alliage métallique. Nous considérerons donc le cas d'un agrégat polycristallin localement anisotrope, avec un comportement de plasticité cristalline.

Nous nous plaçons dans un cadre 2D en déformations planes et deux systèmes de glissement génériques seront utilisés. Avec ce chapitre, nous souhaitons étudier l'influence d'une microstructure cristalline sur les différents champs mécaniques générés par le grenaillage laser. Dans un premier temps, la modélisation de la microstructure et du comportement élastique des grains seront détaillés, suivie du comportement choisi pour la plasticité cristalline. A la suite de cela, nous écrirons l'équation de propagation de l'onde de contrainte en deux dimensions. La méthode numérique utilisée pour la propagation élastique sera ensuite présentée, ainsi que la prise en compte numérique de la plasticité cristalline. Les éléments permettant de réaliser les simulations étant réunis, nous commenceront pas montrer des résultats sur les cas particuliers de monocristaux et bicristaux, avant de simuler le propagation élasto-plastique dans le cas d'une microstructure polycristalline. La section clôturant ce chapitre s'attachera à décrire l'influence moyenne de la microstructure sur les champs mécaniques, afin de considérer l'impact de l'aspect aléatoire des microstructures considérées.

4.1 Introduction

Depuis maintenant plus de 20 ans, les simulations de grenaillage laser sont menées, dans des contextes de recherche et d'applications industrielles, à l'aide de lois de comportement macroscopiques et isotropes [28, 95, 152]. Cette approche fait l'hypothèse que la microstructure hétérogène des matériaux traités (souvent des alliages métalliques) n'a d'influence ni sur la propagation de l'onde de contrainte, ni sur la vitesse en face arrière, et ni sur les contraintes résiduelles induites. Cette hypothèse est valable lorsque les tâches laser utilisées (> 1 mm) sont supérieures de plusieurs ordres de grandeurs à la taille moyenne des grains dont sont constituées les microstructures, mais néglige complètement l'hétérogénéité des contraintes résiduelles provenant des hétérogénéités de déformations dans la microstructure.

Le grenaillage laser est donc traditionnellement utilisé pour des structures macroscopiques (> cm). Cependant, les paramètres classiques du grenaillage laser ne sont pas adaptés pour traiter des micro-composants (pour des applications biomédicales par exemple), et certains auteurs préconisent l'utilisation de laser femtoseconde et de taille de spot microscopique [21]. On parle alors de micro-grenaillage laser, ou micro-LSP. La taille de la tache laser rend cette fois-ci incorrecte l'utilisation de modèles macroscopiques (c'est-à-dire développés et identifié sur des échantillons macroscopiques homogènes), et un changement d'échelle doit être effectué. Plusieurs travaux se sont déjà penchés sur la modélisation de ce procédé. Bien que certains auteurs ne semblent pas avoir considéré de modèles appropriés (Sunny et al. [183] utilisent un modèle de Johnson-Cook pour des grains d'une microstructure polycristalline, tandis Fan et al. [65] utilisent un modèle de Steinberg et une équation d'état pour un impact de diamètre 12 μ m, là où d'autres travaux utilisent des modèles de plasticité cristalline [46, 191, 204], tandis que d'autres choisissent une approche purement expérimentale de la problématique [206]. Seuls Vukelić et al. [189] introduisent simultanément le formalisme de plasticité cristalline et de l'hétérogénéité matérielle en modélisant un bicristal soumis à un choc laser.

Tous ces auteurs reportent logiquement une sensibilité du comportement à l'orientation de la maille cristalline, à l'instar de Breumier et al. [32] qui ont considéré le cas du grenaillage conventionnel, au travers de simulations éléments finis en statique. Nous pouvons enfin mentionner les travaux de Segurado and Lebensohn [173], qui s'intéressent à l'influence d'une microstructure polycristalline sur la propagation d'une onde *élastique*. Ainsi, la propagation d'une onde de contrainte élasto-plastique n'a pas encore été étudiée dans un polycristal. Ce chapitre aura donc pour but d'étudier l'influence de la microstructure sur la propagation de l'onde de contrainte et sur les contraintes résiduelles induites dans le cadre du choc laser.

Pour de faibles densités d'énergie surfacique (~ $GW.cm^{-2}$), le LSP a peu d'influence sur la microstructure [6]. A partir de densités d'énergie surfacique d'environ 10 - 20 GW.cm⁻², une augmentation de la densité de dislocations est remarquée dans la zone traitée [19, 49], jusqu'à aller parfois jusqu'au raffinement des grains [75]. Ces conséquences physiques du LSP ne seront cependant pas considérées dans ce chapitre.

Le chapitre sera organisé de la manière suivante. Une première section sera dédiée à la description de la modélisation des microstructures utilisées, ainsi qu'à la modélisation, élastique puis plastique, du comportement des grains. Ensuite, nous écrirons l'équation de la propagation d'une onde de contrainte dans un formalisme 2D en déformations planes, et détaillerons les méthodes numériques utilisées pour la propagation et pour la résolution de la plasticité cristalline. Ces éléments n'étant utiles que pour la propagation de l'onde de contrainte dans une microstructure, une nouvelle section viendra détailler le calcul des contraintes résiduelles. En s'appuyant sur ces sections, des premiers calculs seront menés sur des cas simples, plus particulièrement des monocristaux et bicristaux. Enfin, dans une dernière section, nous essaieront de quantifier l'effet d'une microstructure polycristalline sur les champs mécaniques induits par le grenaillage laser en adoptant une approche statistique, qui nous permettra de donner des distributions des différents champs en se basant sur un grand nombre de simulations.

4.2 Modèle de polycristal

L'objectif de cette section est de présenter les éléments relatifs à la modélisation d'un polycristal, à savoir sa représentation géométrique à l'aide d'une tesselation de Voronoi, la modélisation du comportement élastique puis plastique des grains.

4.2.1 Modélisation géométrique d'un polycristal

Nous utiliserons dans ce travail une représentation idéalisée d'une microstructure métallique au travers d'une tesselation de Voronoi. Dans une tesselation de Voronoi, chaque grain est initialement représenté par un point, appelé germe. Un grain est ensuite composé de tous les points de l'espace plus proche (au sens de la distance euclidienne par exemple) de son germe que des autres. Ainsi, en reprenant la définition de van Nuland et al. [141], en notant (x_s, y_s) les coordonnées du germe du grain s, ce denier est défini par l'ensemble suivant :

$$C_s = \left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 / \sqrt{(x - x_s)^2 + (y - y_s)^2} \le \sqrt{(x - x_k)^2 + (y - y_k)^2} \ \forall k \neq s \right\},\tag{4.1}$$

où les points (x_k, y_k) sont les coordonnées des germes autres que celui du grain s. Le nombre de grains générés dans un volume ou plan donné peut éventuellement être fixé à l'avance, ou incorporer

une composante aléatoire. Dans ce dernier cas, des « Poisson Voronoi Diagrams » (PVD) [66] sont habituellement utilisés. La probabilité que le nombre de grains soit égal à une valeur donnée suit une loi de Poisson de paramètre η , qui correspond au nombre moyen de grains. A titre de rappel, si la variable Z suit une loi de Poisson de paramètre η , alors la probabilité que Z = q est donnée par :

$$P(Z = q) = \frac{\eta^{q}}{q!} e^{-\eta}.$$
(4.2)

Dans le cadre ce travail, les coordonnées des germes sont attribuées de manière aléatoire suivant une distribution uniforme dans le plan. De plus, les interfaces entre les grains seront ici supposés parfaites. Il est importer de noter que la démarche ici n'est pas de modéliser la microstructure d'un alliage métallique particulier, mais d'en donner une représentation générique suffisante pour notre travail, qui pourra éventuellement être affinée ensuite. Un exemple de diagramme de Voronoi généré avec cette procédure et contenant 21 grains est présenté sur la Figure 4.1.



FIGURE 4.1 – Illustration d'une tesselation de Voronoi. Les points blancs correspondent aux germes des grains. Le code couleur sert à identifier les grains différents.

Il est possible pour une tesselation de Voronoi telle que celle présentée sur la Figure 4.1 d'identifier la taille moyenne des grains¹. Les travaux de Zhang et al. [202] et Zhang et al. [203] introduisent un paramètre de régularité β , défini tel que :

$$\beta = \frac{\delta}{d_{\text{grain}}},\tag{4.3}$$

où d_{grain} correspond à la distance entre les germes d'une tesselation régulière constituée d'hexagones, et δ la distance minimale entre deux germes de la tesselation. Cette grandeur est liée à la surface occupée S par un hexagone par la formule suivante [203] :

$$d_{\text{grain}} = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{3}}S}.$$
(4.4)

^{1.} La distribution des tailles de grain obtenues par un diagramme de Voronoi présente moins de dispersion qu'une microstructure réelle [116].

S peut être évaluée par $S = S_0/N_{\text{grain}}$, où S_0 est la surface totale considérée, et N_{grain} le nombre de grains. Nous pouvons toutefois noter que $\sqrt{2/\sqrt{3}} \approx 1$. Le résultat donné dans l'Equation (4.4) est donc proche de celui obtenu en divisant la surface totale par le nombre de grain. Dans la procédure permettant de générer une tesselation de Voronoi indiquée par les auteurs, un germe n'est donc accepté que si il est distant de tout les autres d'une distance d'au moins δ . La surface moyenne des grains de la tesselation vaut donc S, avec une variation de plus en plus restreinte au fur et à mesure que β augmente. La Figure 4.1 correspond à un cas où $\beta = 0$.

A chaque grain peut être affecté un comportement mécanique diffèrent. Plus particulièrement, nous considérerons que tous les grains sont identiques en terme de propriétés mécaniques (tenseurs des rigidités \mathbb{C} anisotrope et masses volumiques ρ uniformes), mais pas en terme d'orientations.

L'orientation cristalline d'un grain peut être définie à l'aide des angles d'Euler, notés φ_1 , ϕ et φ_2 . Selon la convention de Bunge [37], ces angles permettent d'orienter un grain dans l'espace, comme illustré sur la Figure 4.2.



FIGURE 4.2 – Définition des angles d'Euler selon la convention de Bunge [37]. S : repère de l'échantillon, C : repère du cristal.

Une préoccupation principale de la modélisation cristalline de ce travail est de conserver un état de déformations planes, en accord avec la Section 4.3.1. Comme nous le verrons par la suite, imposer $\phi = \varphi_2 = 0$ nous permet de vérifier cette condition en plasticité. Il ne sera donc nécessaire que de garder un seul angle d'Euler non nul, à savoir φ_1 , dont la valeur changera d'un grain à l'autre dans la tesselation de Voronoi. A chaque grain est donc associée une matrice de rotation $\mathbf{R}(x, y)$ telle que :

$$\boldsymbol{R}(x,y) = \begin{pmatrix} \cos\varphi_1(x,y) & -\sin\varphi_1(x,y) & 0\\ \sin\varphi_1(x,y) & \cos\varphi_1(x,y) & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(4.5)

La géométrie de la microstructure est maintenant définie, nous pouvons nous intéresser au comportement élastique local (i.e. à l'échelle d'un grain) dans un premier temps (le comportement plastique sera abordé dans la Section 4.2.3 de ce chapitre).

4.2.2 Comportement élastique d'un grain

Nous considérerons dans ce travail des matériaux cubiques. Le comportement élastique est de symétrie cubique, représenté par le tenseur des rigidités \mathbb{C}^0 suivant (en notation de Kelvin, parfois appelée Voigt modifiée) dans le repère associé à la maille cristalline :

$$\mathbb{C}^{0} = \begin{pmatrix} C_{1111}^{0} & C_{1122}^{0} & C_{1122}^{0} & 0 & 0 & 0\\ C_{1122}^{0} & C_{1111}^{0} & C_{1122}^{0} & 0 & 0 & 0\\ C_{1122}^{0} & C_{1122}^{0} & C_{1111}^{0} & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 2C_{1212}^{0} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2C_{1212}^{0} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2C_{1212}^{0} \end{pmatrix},$$
(4.6)

avec $C_{1212}(x, y) \neq C_{1111}(x, y) - C_{1122}(x, y)$. Comme indiqué dans la Section 4.2.1, à chaque grain dans la tesselation de Voronoi correspondra une orientation cristalline différente. Cette rotation s'applique au tenseur \mathbb{C}^0 , dont la nature n'implique pas d'invariance par rotation. Le tenseur des rigidités exprimé dans le repère de l'échantillon, noté $\mathbb{C}(x, y)$ après application de la rotation $\mathbf{R}(x, y)$ est donné en notation à deux indices (k et l variant de 1 à 6) :

$$\mathbb{C}_{kl}(x,y) = \sum_{m=1}^{6} \sum_{n=1}^{6} \mathbb{R}_{km}(x,y) \mathbb{R}_{ln}(x,y) \mathbb{C}_{mn}^{0}.$$
(4.7)

Le tenseur $\mathbb R$ est obtenu à l'aide de :

$$\mathbb{R}_{kl} = \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} \sum_{m=1}^{3} \sum_{n=1}^{3} \beta_{kij} \mathbf{R}_{jn} \mathbf{R}_{im} \chi_{mnl}, \qquad (4.8)$$

avec les coefficients β_{ijk} et χ_{ijk} définis pour la notation de Kelvin par :

$$\begin{cases} \beta_{ijk} = 0 & \text{sauf} \\ \chi_{ijk} = 0 & \text{sauf} \end{cases} \begin{cases} \beta_{111} = \beta_{222} = \beta_{333} = 1 \\ \beta_{423} = \beta_{432} = \beta_{513} = \beta_{531} = \beta_{612} = \beta_{621} = \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \chi_{111} = \chi_{222} = \chi_{333} = 1 \\ \chi_{234} = \chi_{324} = \chi_{135} = \chi_{315} = \chi_{126} = \chi_{216} = \frac{1}{\sqrt{2}} \end{cases}$$
(4.9)

Plus précisément, la forme générale du tenseur des rigidités (dans le repère de l'échantillon) compte tenu des conditions sur les angles d'Euler est la suivante (la notation (x, y) est abandonnée à l'intérieur de la matrice par soucis de lisibilité) :

$$\mathbb{C}(x,y) = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & 0 & 0 & \sqrt{2}C_{1112} \\ C_{1122} & C_{2222} & C_{2233} & 0 & 0 & \sqrt{2}C_{2212} \\ C_{1122} & C_{1122} & C_{3333} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2C_{2323} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2C_{1313} & 0 \\ \sqrt{2}C_{1112} & \sqrt{2}C_{2212} & 0 & 0 & 0 & 2C_{1212} \end{pmatrix},$$
(4.10)

avec $C_{2222} = C_{1111}$, $C_{3333} = C_{1111}^0$, $C_{1133} = C_{2233} = C_{1122}^0$ et $C_{2323} = C_{1313} = C_{1212}^0$. Ces résultats sont attendus, dans la mesure où les rotations imposées ne se font que dans un plan du repère de l'échantillon.

4.2. MODÈLE DE POLYCRISTAL

Lorsqu'une onde de contrainte arrive au niveau d'une interface entre deux grains de raideurs différentes, des ondes transmises et réfléchies sont émises, dont les amplitudes dépendent de la quantité $\sqrt{c^{(1)}/c^{(2)}}^2$ [190], c correspondant à la vitesse de l'onde dans une direction donnée, les indices (1) et (2) correspondant aux grains définissant l'interface. A titre d'exemple, considérons un grain d'Aluminium AA1050, dont le comportement est défini par $C_{1111}^0 = 106.75$ GPa, $C_{1122}^0 = 60.41$ GPa et $C_{1212}^0 = 28.34$ GPa [201]. Nous pouvons noter que le coefficient de Zener $2C_{1212}/(C_{1111} - C_{1122}) = 1.22$ est proche de 1 pour ce matériau, indiquant une faible anisotropie élastique (le coefficient de Zener est unitaire pour un matériau isotrope). Les variations des éléments du tenseur \mathbb{C} en fonction de l'angle d'Euler φ_1 sont illustrées dans la Figure 4.3.



FIGURE 4.3 – Variation des coefficients du tenseur des rigidités en fonction du premier angle d'Euler φ_1 . (a) Coefficients (hors coefficients de couplage) normalisés. (b) Coefficients de couplage.

La Figure 4.3 montre que les coefficients d'un tenseur des rigidités anisotrope (ici cubique) varient lorsque le tenseur \mathbb{C}^0 subit une rotation. Les variations sont symétriques pour des valeurs de φ_1 négatives, et ont une période de $\pi/2$. Ces variations sont cependant faibles pour les coefficients C_{1111} , C_{1122} et C_{1212} (voir Figure 4.3(a)). Le contraste mécanique maximal est atteint pour deux grains orientés à $\varphi_1 = 0$ et $\varphi_1 = \pi/4$, mais conduit à des différences faibles sur les coefficients de \mathbb{C} . En revanche, les rotations font apparaître des termes de couplage C_{1112} et C_{2212} (voir Figure 4.3(b)).

Pour nos applications, il est nécessaire de considérer le comportement plastique des grains. La section suivante va donc décrire le modèle visco-plastique utilisé.

4.2.3 Description du comportement plastique

Les éléments de plasticité cristalline nécessaires ici ont été présentés dans la Section 1.4.2 du Chapitre 1. La plasticité à l'échelle du cristal se traduit par des mouvements de dislocations sur des systèmes de glissement. Les modèles de plasticité cristalline introduisent des variables internes correspondant à des multiplicateurs plastiques $\gamma^{(\alpha)}$ propres à chaque système de glissement. Il est

^{2.} Pour des masse volumiques égales entre les grains $\rho^{(1)} = \rho^{(2)}$. Pour deux matériaux isotropes, $\sqrt{c^{(1)}/c^{(2)}} = \sqrt{C_{1111}^{(1)}/C_{1111}^{(2)}}$

ensuite possible de déterminer la vitesse de déformation plastique du matériau cristallin par :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)}, \qquad (4.11)$$

où $\mu^{(\alpha)}$ est le tenseur de Schmid du système de glissement α défini tel que :

$$\boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \left(\boldsymbol{t}^{(\alpha)} \otimes \boldsymbol{n}^{(\alpha)} + \boldsymbol{n}^{(\alpha)} \otimes \boldsymbol{t}^{(\alpha)} \right), \qquad (4.12)$$

avec $t^{(\alpha)}$ et $n^{(\alpha)}$ des vecteurs unitaires parallèles à la direction et la normale du système de glissement, respectivement. Il est également utile de calculer les tenseurs de Schmid asymétriques, afin de déterminer la vitesse de rotation plastique de la maille cristalline notée $\dot{\omega}_p$:

$$\boldsymbol{\mu}_{\text{antisym}}^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \left(\boldsymbol{t}^{(\alpha)} \otimes \boldsymbol{n}^{(\alpha)} - \boldsymbol{n}^{(\alpha)} \otimes \boldsymbol{t}^{(\alpha)} \right), \tag{4.13}$$

 et

$$\dot{\boldsymbol{\omega}}_p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \boldsymbol{\mu}_{\text{antisym},0}^{(\alpha)}.$$
(4.14)

Avec l'Equation (4.11), il apparaît donc que les composantes non nulles de la déformation plastique correspondent aux composantes non nulles des tenseurs de Schmid des systèmes de glissement activés. Or, comme présenté dans la Section 4.3.1, nous souhaitons conserver un état de déformation plane durant la propagation de l'onde de contrainte. Afin de vérifier cette condition, nous faisons une hypothèse forte sur la nature et le nombre de systèmes de glissement que nous considérerons. En effet, considérer l'ensemble des systèmes de glissement d'un type de maille cristalline donné (12 par exemple pour la maille CFC) impliquerait un état de déformation en trois dimensions. Nous ne garderons donc que deux systèmes de glissement, fixés arbitrairement et exprimés dans le repère de référence par :

système 1 : (100)[010] et système 2 :
$$\frac{1}{\sqrt{2}}$$
 (110) [$\overline{1}10$]. (4.15)

Le système de glissement 2 correspond donc au système de glissement 1 tourné de 45°. Nous pouvons alors vérifier que les tenseurs de Schmid dans le repère du cristal n'engendrent aucune déformation plastique hors plan :

$$\boldsymbol{\mu}_{0}^{(1)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\mu}_{0}^{(2)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
(4.16)

Pour les systèmes de glissement choisis, les tenseurs de Schmid antisymétriques valent

$$\boldsymbol{\mu}_{\text{antisym},0}^{(1)} = \boldsymbol{\mu}_{\text{antisym},0}^{(2)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$
(4.17)

Les tenseurs de Schmid peuvent également être exprimés dans le repère de l'échantillon :

$$\mu_{ij}(x,y) = R_{im}(x,y)R_{jn}(x,y)\mu_{0mn}.$$
(4.18)

Il est alors possible de vérifier qu'aucune composante hors plan n'est générée pour des tenseurs de Schmid pour les rotations définies par φ_1 comme seul angle non nul. Ce résultat finit de confirmer
que ce choix des systèmes de glissement utilisés, ainsi que celui de ne faire varier que le premier angle d'Euler permet de conserver un état de déformation plastique plane. Il est intéressant de constater que pour ces systèmes de glissement, $\mu_{antisym,0}^{(1)}$ et $\mu_{antisym,0}^{(2)}$ sont invariants pour les rotations caractérisées par le premier angle d'Euler comme seul angle non nul. L'influence de l'orientation sur la rotation de la maille cristalline proviendra donc des valeurs des $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ seulement, contrairement à la déformation plastique, qui est influencée par l'orientation cristalline.

La détermination des quantités $\gamma^{(\alpha)}$ est ensuite faite avec un modèle de visco-plasticité cristalline. Avec le modèle visco-plastique développé par Hutchinson [90], déjà présenté dans la Section 1.4.2.2, les multiplicateurs plastiques des plans de glissement sont donnés par :

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0 \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{m-1} = \dot{\gamma}^{(\alpha)} \text{signe}\left(\frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}}\right) \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^m, \tag{4.19}$$

où $\dot{\gamma}_0$ est un paramètre représentant une vitesse de déformation de référence, m est un exposant positif. La quantité $\tau^{(\alpha)}$ est la cission résolue sur le système de glissement α donnée par $\tau^{(\alpha)} = \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)}$. Enfin, $g^{(\alpha)}$ est la résistance du système de glissement α . Le modèle visco-plastique est un modèle dit sans seuil. En effet, la plasticité n'intervient non pas une fois que la contrainte dépasse un certain seuil, mais pour tout état de contrainte non nulle. Cependant, pour des valeurs de m grandes (m > 10), les faibles valeurs de contraintes et donc de cission résolue (devant $g^{(\alpha)}$) ne génèrent qu'une faible vitesse de déformation plastique. Pour la suite de ce travail, nous proposons donc une formulation modifiée du modèle de l'Equation (4.19) à seuil :

$$\begin{cases} \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0 & \text{si} \quad \left| \tau^{(\alpha)} \right| \le g^{(\alpha)} \\ \dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0 \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{m-1} & \text{si} \quad \left| \tau^{(\alpha)} \right| > g^{(\alpha)}. \end{cases}$$

$$(4.20)$$

Cette formulation permet d'optimiser la résolution numérique du modèle visco-plastique, puisque la plasticité n'est induite qu'à condition que la cission résolue sur un système de glissement soit supérieure à la cission critique associée. Les équations ne sont donc pas résolues en tout point du domaine spatial, mais à ceux nécessitant une correction plastique. Dans la mesure où les quantités $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ sont négligeables lorsque $|\tau^{(\alpha)}| \leq g^{(\alpha)}$ avec le modèle de l'Equation (4.19), la formulation de l'Equation (4.20) lui est équivalente.

Nous allons pouvoir utiliser le comportement défini dans cette section pour écrire l'équation de la propagation d'une onde de contrainte en deux dimensions.

4.3 Modélisation en deux dimensions de la propagation d'une onde de contrainte élasto-plastique

L'objectif de cette section est, à l'image du Chapitre 2, de présenter les fondements théoriques menant à l'écriture de l'équation de propagation d'une onde de contrainte élasto-plastique. De nouveau, un aspect du travail concernera les méthodes numériques utilisées pour les simulations. La particularité de cette section est que le travail du Chapitre 2 est étendu à un cas en deux dimensions. Une modélisation 2D est considérée, comme compromis entre une modélisation réaliste du grenaillage laser

4.3. MODÉLISATION EN DEUX DIMENSIONS DE LA PROPAGATION D'UNE ONDE DE CONTRAINTE ÉLASTO-PLASTIQUE

et des temps de calculs raisonnables pour les simulations. La situation à modéliser correspond au schéma de la Figure 4.4.



FIGURE 4.4 – Illustration du procédé de LSP pour la modélisation 2D.

 L_x et L_y sont les dimensions du domaine spatial dans les directions x et y respectivement, et d est le diamètre du spot laser.

4.3.1 Modélisation en déformation plane

Nous commençons par rappeler les équations décrivant le comportement élastique 3 d'un matériau (en l'absence de forces extérieures) :

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) = \rho(x, y) \frac{\partial^2 \boldsymbol{u}}{\partial t^2} & \text{Equilibre dynamique} \\ \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}(x, y) : \boldsymbol{\varepsilon}_e = \mathbb{C}(x, y) : \boldsymbol{\varepsilon} & \text{Loi de Hooke} \\ \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) = \frac{1}{2} \left(\nabla \boldsymbol{u} + \nabla^T \boldsymbol{u} \right) & \text{Relation déformation-déplacement} \\ \boldsymbol{u}(x, y, t = 0) = \boldsymbol{0} & \text{Conditions initiales,} \end{cases}$$
(4.21)

où σ est le tenseur des contraintes, ε le tenseur des déformations totales, ε_e le tenseur des déformations élastiques (ici égal à ε en l'absence de déformations plastiques), et u le champ de déplacement. La masse volumique est notée ρ et le tenseur des rigidités local $\mathbb{C}(x, y)$. Ce dernier est de la forme générale donnée par l'Equation (4.10). Afin d'éliminer l'énergie cinétique du système pour obtenir un champ de déformations plastiques stationnaires, nous implémenterons des conditions aux limites non-réflectives,

^{3.} Seul le comportement élastique est présenté pour le moment, le comportement plastique faisant l'objet d'une section dédiée.

pour permettre à l'onde de contrainte de quitter le domaine. L'implémentation de ces conditions aux limites sera détaillée dans la Section 4.5.1.

La modélisation en deux dimensions du problème implique le choix d'une hypothèse de modélisation : contraintes planes ou déformations planes⁴. La modélisation en contrainte plane implique $\sigma_{33}(x, y, t) = 0$, ce qui équivaut à une plaque d'épaisseur très faible. En déformation plane, $\varepsilon_{33}(x, y, t) = 0$, ce qui correspond à une plaque d'épaisseur infinie ou très grande. En toute rigueur, aucune de ces deux modélisations ne correspond à la réalité expérimentale, qui ne peut être simplifiée que dans le cas d'un impact circulaire unique (géométrie axisymétrique). Conscients de cela, nous faisons le choix d'utiliser une hypothèse de déformations planes, qui semble être l'hypothèse de modélisation en 2D la plus adaptée. Ainsi, le champ de déplacement u peut être exprimé de la manière suivante :

$$u = u_x(x, y, t)e_1 + u_y(x, y, t)e_2.$$
(4.22)

Dans la suite, les composantes des champs de déplacements u_x et u_y , du champs de déformations ε_{11} , ε_{22} et ε_{12} , et du champs de contraintes σ_{11} , σ_{22} , σ_{12} et σ_{33} dépendent des coordonnées spatiales et temporelles, respectivement x, y et t. Les notations seront cependant abandonnées dans la suite pour soucis de clarté. Il en va de même pour la dépendance aux cordonnées spatiales de \mathbb{C} et ρ . D'après l'Equation (4.21)₃, il en découle :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\varepsilon} = \varepsilon_{11}\boldsymbol{e}_{1} \otimes \boldsymbol{e}_{1} + \varepsilon_{22}\boldsymbol{e}_{2} \otimes \boldsymbol{e}_{2} + \varepsilon_{12}(\boldsymbol{e}_{1} \otimes \boldsymbol{e}_{2} + \boldsymbol{e}_{2} \otimes \boldsymbol{e}_{1}) \\ \varepsilon_{11} = \frac{\partial u_{x}}{\partial x} \\ \varepsilon_{22} = \frac{\partial u_{y}}{\partial y} \\ \varepsilon_{12} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_{x}}{\partial y} + \frac{\partial u_{y}}{\partial x} \right). \end{cases}$$

$$(4.23)$$

La loi de Hooke $(4.21)_2$ avec la forme du tenseur \mathbb{C} de l'Equation (4.10) donne donc :

$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma_{11}\boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_1 + \sigma_{22}\boldsymbol{e}_2 \otimes \boldsymbol{e}_2 + \sigma_{33}\boldsymbol{e}_3 \otimes \boldsymbol{e}_3 + \sigma_{12}(\boldsymbol{e}_1 \otimes \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_2 \otimes \boldsymbol{e}_1). \tag{4.24}$$

Avec l'hypothèse des déformations planes, la composante de contrainte σ_{33} peut être obtenue à partir des composantes σ_{11} , σ_{22} et σ_{12} via la loi de Hooke.

Il est maintenant possible, à l'aide des équations ci-dessus, d'aboutir à l'équation de propagation d'une onde de contrainte en déformations planes.

4.3.2 Équation de propagation d'une onde de contrainte en deux dimensions

Pour obtenir l'équation de propagation, nous suivons la méthodologie de Leveque [119]. L'équation de l'équilibre dynamique $(4.21)_1$ conduit au système suivant :

$$\begin{cases}
\frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial y} = \rho(x, y) \frac{\partial v_x}{\partial t} \\
\frac{\partial \sigma_{12}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{22}}{\partial y} = \rho(x, y) \frac{\partial v_y}{\partial t},
\end{cases}$$
(4.25)

^{4.} Il aurait également été possible d'utiliser une modélisation en « vrai » 2D, en ne considérant pas les lignes et colonnes des tenseurs des contraintes et déformations correspondant à la direction hors plan.

4.3. MODÉLISATION EN DEUX DIMENSIONS DE LA PROPAGATION D'UNE ONDE DE CONTRAINTE ÉLASTO-PLASTIQUE

où v_x et v_y sont les composantes du champ de vitesse matérielle v, telle que $v_x = \partial u_x/\partial t$ et $v_y = \partial u_y/\partial t$. De plus, avec l'hypothèse des petites perturbations, nous avons

$$\begin{cases} \frac{\partial \varepsilon_{11}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_x}{\partial t} \right) = \frac{\partial v_x}{\partial x} \\ \frac{\partial \varepsilon_{22}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial u_y}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_y}{\partial t} \right) = \frac{\partial v_y}{\partial y} \\ \frac{\partial \varepsilon_{12}}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right). \end{cases}$$
(4.26)

La loi de Hooke $(4.21)_1$ dérivée par rapport au temps donne ainsi :

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial t} = C_{1111} \frac{\partial v_x}{\partial x} + C_{1122} \frac{\partial v_y}{\partial y} + C_{1112} \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial \sigma_{22}}{\partial t} = C_{1122} \frac{\partial v_x}{\partial x} + C_{2222} \frac{\partial v_y}{\partial y} + C_{2212} \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial t} = C_{1112} \frac{\partial v_x}{\partial x} + C_{2212} \frac{\partial v_y}{\partial y} + C_{1212} \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right). \end{cases}$$
(4.27)

Les systèmes (4.25) et (4.27) peuvent être regroupés dans l'équation matricielle suivante, en utilisant les notations de Leveque [119] :

$$\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t} + \boldsymbol{A}(x, y) \frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial x} + \boldsymbol{B}(x, y) \frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial y} = \boldsymbol{0}, \qquad (4.28)$$

où U est le vecteur des inconnues tel que $U = (\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{12}, v_x, v_y)^T$. Les matrices A et B sont construites telles que :

$$\boldsymbol{A}(x,y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -C_{1111} & -C_{1112} \\ 0 & 0 & 0 & -C_{1122} & -C_{2212} \\ 0 & 0 & 0 & -C_{1112} & -C_{1212} \\ \frac{1}{-\frac{1}{\rho}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{\rho} & 0 & 0 \end{pmatrix},$$
(4.29)

 et

$$\boldsymbol{B}(x,y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -C_{1112} & -C_{1122} \\ 0 & 0 & 0 & -C_{2212} & -C_{2222} \\ 0 & 0 & 0 & -C_{1212} & -C_{2212} \\ 0 & 0 & -\frac{1}{\rho} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\rho} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$
 (4.30)

L'Equation (4.28) correspond à l'équation d'advection en deux dimensions, et modélise ici la propagation d'une onde de contrainte en déformations planes. Cette équation diffère de l'équation d'advection en une dimension (Equations (1.50) et (3.13)) par un nombre d'inconnues plus grand, ainsi que par l'ajout d'un terme dû à la dépendance spatiale des inconnues à la nouvelle coordonnée. Telle quelle, l'Equation (4.28) modélise intrinsèquement trois phénomènes de propagation d'onde : une onde de

4.3. MODÉLISATION EN DEUX DIMENSIONS DE LA PROPAGATION D'UNE ONDE DE CONTRAINTE ÉLASTO-PLASTIQUE

traction/compression longitudinale (dans la direction de l'impact), une onde de traction/compression transversale (perpendiculairement à la direction de l'impact) et une onde de cisaillement (la vitesse de cette dernière diffère selon les directions longitudinales ou transversales). Les valeurs propres des matrices \boldsymbol{A} et \boldsymbol{B} permettent de déterminer les vitesses de ces ondes, pour un matériau anisotrope :

$$c_{\text{longi}} = \frac{\sqrt{2}}{2\rho} \sqrt{C_{1111} + C_{1212} + \sqrt{(C_{1111} - C_{1212})^2 + 4C_{1112}^2}}$$

$$c_{\text{trans}} = \frac{\sqrt{2}}{2\rho} \sqrt{C_{2222} + C_{1212} + \sqrt{(C_{2222} - C_{1212})^2 + 4C_{2212}^2}}$$

$$c_{\text{cis},1} = \frac{\sqrt{2}}{2\rho} \sqrt{C_{1111} + C_{1212} - \sqrt{(C_{1111} - C_{1212})^2 + 4C_{1112}^2}}$$

$$c_{\text{cis},2} = \frac{\sqrt{2}}{2\rho} \sqrt{C_{2222} + C_{1212} - \sqrt{(C_{2222} - C_{1212})^2 + 4C_{2212}^2}}.$$
(4.31)

Dans le cas d'un matériau isotrope, nous retrouvons :

$$c_{\text{longi}} = c_{\text{trans}} = \sqrt{\frac{C_{1111}}{\rho}}, \ c_{\text{cis},1} = c_{\text{cis},2} = c_{\text{cis}} = \sqrt{\frac{C_{1212}}{\rho}},$$
 (4.32)

où c_{longi} désigne la vitesse de l'onde se propageant parallèlement à la direction de l'impact, c_{trans} celle dont la direction est perpendiculaire à la direction de l'impact et c_{cis} celle de l'onde de cisaillement. Il est maintenant intéressant d'étudier l'influence qu'ont les rotations du tenseur des rigidités (voir Section 4.2.2) sur les vitesses de propagation élastiques des différentes ondes. Ces vitesses peuvent être obtenues en prenant les valeurs absolues des valeurs propres des matrices A et B des Equations (4.29) et (4.30). Ces résultats sont présentés sur la Figure 4.5, où la notation c_0 signifie la vitesse correspondante calculée à l'aide du tenseur \mathbb{C}^0 dans le repère de la maille cristalline (i.e. pour $\varphi_1 = 0$).



FIGURE 4.5 – Variations des vitesses de propagation des ondes longitudinales, transversales et de cisaillement en fonction du premier angle d'Euler φ_1 .

La Figure 4.5 fait apparaître que les variations des vitesses de propagation sont de l'ordre de quelques pourcents (au maximum 10% environ) selon l'orientation cristalline du grain. Les vitesses

des ondes transversales et longitudinales sont confondues, ce qui fait sens avec l'expression de \mathbb{C} , car $C_{1111} = C_{2222}$. De même, la notation c_{cis} fait dans ce cas référence aux deux expressions de $c_{\text{cis},1}$ et $c_{\text{cis},2}$ qui sont alors égales, car nous avons également $C_{1112}^2 = C_{2212}^2$.

Maintenant que l'équation gouvernant la propagation de l'onde de contrainte en deux dimensions est posée, nous pouvons chercher à la résoudre numériquement.

4.3.3 Méthodes numériques pour la simulation de la propagation d'une onde de contraintes en deux dimensions

Nous allons ici de nouveau faire appel aux méthodes numériques évoquées dans la Section 1.8 du Chapitre 1. Soit U_{ij}^n le vecteur des inconnues discrétisées, évaluées à l'incrément de temps n et à la cellule spatiale ij, correspondant au point de coordonnées (x_i, y_j) . Les coordonnées x_i et y_j correspondent à la discrétisation spatiale définie comme $x_{i+1} = x_i + \Delta x$ et $y_{j+1} = y_j + \Delta y$. Nous introduisons également l'incrément de temps Δt tel que $t^{n+1} = t^n + \Delta t$. Afin de résoudre numériquement l'Equation (4.28), nous allons utiliser un schéma d'intégration numérique explicite. Ce type d'algorithme ne produit des résultats stables que s'il vérifie la condition dite CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) définie telle que :

$$CFL = c_{\max} \frac{\Delta t}{\Delta x} \le 1, \tag{4.33}$$

où

$$c_{\max} = \max_{x,y \in [0,L_x] \times [0,L_y]} \left\{ c_{\text{longi}}(x,y), c_{\text{trans}}(x,y), c_{\text{cis}}(x,y) \right\}.$$
(4.34)

Dans les faits, c_{max} est imposée par la description du matériau, et les quantités CFL et Δx sont des données d'entrée de la simulations, avec lesquelles il est possible de déterminer la valeur de Δt à l'aide de l'Equation (4.33). Selon Leveque [119], la forme générale de la résolution numérique de l'Equation (4.28) prend ici la forme suivante :

$$\boldsymbol{U}_{i,j}^{n+1} = \boldsymbol{U}_{i,j}^{n} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\boldsymbol{F}_{i+1/2,j}^{n} - \boldsymbol{F}_{i-1/2,j}^{n} \right) - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(\boldsymbol{G}_{i,j+1/2}^{n} - \boldsymbol{G}_{i,j-1/2}^{n} \right),$$
(4.35)

où les quantités $F_{i+1/2,j}^n$, $F_{i-1/2,j}^n$, $G_{i,j+1/2}^n$ et $G_{i,j-1/2}^n$ sont désignées comme des flux, et dont l'expression varie selon la méthode numérique. En plus des considérations habituelles sur les capacités de la méthode numérique à introduire peu d'erreurs numériques, il devient nécessaire dans ce cas 2D d'optimiser la résolution afin de limiter les temps de calcul. Pour ces raisons, la méthode de Godunov

est ici adaptée. Les flux ont alors les expressions suivantes :

$$\begin{cases} F_{i-1/2,j}^{n} = A^{+}U_{i-1,j}^{n} + A^{-}U_{i,j}^{n} - \frac{\Delta t}{2\Delta y} \left(A^{-}B^{-} \left(U_{i,j+1}^{n} - U_{i,j}^{n} \right) + A^{+}B^{-} \left(U_{i-1,j+1}^{n} - U_{i-1,j}^{n} \right) \right) \\ A^{-}B^{+} \left(U_{i,j}^{n} - U_{i,j-1}^{n} \right) + A^{+}B^{+} \left(U_{i-1,j}^{n} - U_{i-1,j-1}^{n} \right) \right) \\ F_{i+1/2,j}^{n} = A^{+}U_{i,j}^{n} + A^{-}U_{i+1,j}^{n} - \frac{\Delta t}{2\Delta y} \left(A^{-}B^{-} \left(U_{i+1,j+1}^{n} - U_{i+1,j}^{n} \right) + A^{+}B^{-} \left(U_{i,j+1}^{n} - U_{i,j}^{n} \right) \right) \\ A^{-}B^{+} \left(U_{i+1,j}^{n} - U_{i+1,j-1}^{n} \right) + A^{+}B^{+} \left(U_{i,j}^{n} - U_{i,j-1}^{n} \right) \right) \\ G_{i,j-1/2}^{n} = B^{+}U_{i,j-1}^{n} + B^{-}U_{i,j}^{n} - \frac{\Delta t}{2\Delta y} \left(B^{-}A^{-} \left(U_{i+1,j}^{n} - U_{i,j}^{n} \right) + B^{+}A^{-} \left(U_{i+1,j-1}^{n} - U_{i,j-1}^{n} \right) \right) \\ G_{i,j+1/2}^{n} = B^{+}U_{i,j}^{n} + B^{-}U_{i,j+1}^{n} - \frac{\Delta t}{2\Delta y} \left(B^{-}A^{-} \left(U_{i+1,j+1}^{n} - U_{i,j+1}^{n} \right) + B^{+}A^{-} \left(U_{i+1,j}^{n} - U_{i,j}^{n} \right) \right) \\ G_{i,j+1/2}^{n} = B^{+}U_{i,j}^{n} + B^{-}U_{i,j+1}^{n} - \frac{\Delta t}{2\Delta y} \left(B^{-}A^{-} \left(U_{i+1,j+1}^{n} - U_{i,j+1}^{n} \right) + B^{+}A^{-} \left(U_{i+1,j}^{n} - U_{i,j}^{n} \right) \right) \right) .$$

$$(4.36)$$

Les matrices A^+ , A^- , B^+ et B^- sont définies de la même manière que dans la Section 1.8.2.3, comme rappelé ici (seulement pour la matrice A) :

$$A^+ = PD^+P^{-1}$$
 et $A^- = PD^-P^{-1}$, (4.37)

avec

$$\boldsymbol{D}_{ij}^{+} = \delta_{ij} \max\left(0, \lambda_{j}\right) \quad \text{et} \quad \boldsymbol{D}_{ij}^{-} = \delta_{ij} \min\left(0, \lambda_{j}\right), \tag{4.38}$$

où λ_j désigne la $j^{\text{iéme}}$ valeur propre de la matrice A, δ_{ij} est le symbole de Kronecker, et P est la matrice de passage de A.

De cette manière, le terme $U_{i,j}^{n+1}$ est calculé par combinaison linéaire des valeurs de U^n . Il est donc possible de calculer l'état à l'incrément temporel suivant de tout le système avec

$$\boldsymbol{X}^{n+1} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{X}^n, \tag{4.39}$$

avec $\mathbf{X}^n = \left(\mathbf{U}_{1,1}^n \mathbf{U}_{1,2}^n \dots \mathbf{U}_{1,N_y}^n \mathbf{U}_{2,1}^n \dots \mathbf{U}_{N_x,1}^n \dots \mathbf{U}_{N_x,N_y}^n\right)^T$, où N_x et N_y sont les nombres de nœuds du domaine spatial dans la direction x et y respectivement. \mathbf{Q} est une matrice de taille $(5N_xN_y) \times (5N_xN_y)$ construite à l'aide des matrices \mathbf{A}^+ , \mathbf{A}^- , \mathbf{B}^+ et \mathbf{B}^- . L'Equation (4.39) permet donc de calculer l'état du système à l'incrément n+1. Le Chapitre 1 a présenté une méthode numérique plus précise que celle de Godunov utilisée ici, à savoir la méthode de Godunov à haute résolution, qui fait intervenir un terme correctif. Cependant, ce terme correctif n'est pas linéaire par rapport à la variable \mathbf{U} , et l'obtention d'une équation de la forme de (4.39) n'est pas possible. La seule manière d'utiliser cette méthode numérique plus précise est de résoudre l'équation de propagation point par point, ce qui abouti à des temps de calculs longs.

Les éléments sont réunis pour résoudre la propagation *élastique* de la propagation de l'onde de contrainte en déformations planes. Il reste cependant à traiter de l'intégration numérique du comportement plastique.

4.3.4 Traitement numérique de la plasticité cristalline

4.3.4.1 Mise en équation

Lors de la résolution numérique d'un problème de plasticité cristalline avec le modèle viscoplastique, le système posséde autant de variables internes que de systèmes de glissement. En effet, la connaissance des multiplicateurs plastiques permet de déduire l'ensemble de variables du problème, de la déformation à la contrainte en passant par la rotation de la maille cristalline. La détermination des multiplicateurs plastiques se fait par la détermination du zéro d'une fonction vectorielle, comme documenté dans Huang [89] et Harewood and McHugh [82]. Les dérivées temporelles du premier ordre sont ici discrétisées par un schéma d'Euler :

$$\dot{a} = \frac{a^{n+1} - a^n}{\Delta t} = \frac{\Delta a}{\Delta t},\tag{4.40}$$

où a est une grandeur quelconque. En reprenant la méthodologie de Huang [89], les quantités $\Delta \gamma^{(\alpha)}$ peuvent être exprimées de la manière suivante :

$$\Delta \gamma^{(\alpha)} = (1 - \theta) \,\Delta t \dot{\gamma}^{(\alpha), n} + \theta \Delta t \dot{\gamma}^{(\alpha), n+1}. \tag{4.41}$$

Les incréments $\Delta \gamma^{(\alpha)}$ sont donc déterminés par interpolation linéaire (contrôlée par un paramètre θ tel que $\theta \in [0,1]$) des variations temporelle de $\gamma^{(\alpha)}$ à l'instant précédent $\dot{\gamma}^{(\alpha),n}$ et à l'instant suivant $\dot{\gamma}^{(\alpha),n+1}$. En injectant l'Equation (4.19), nous obtenons alors :

$$\Delta \gamma^{(\alpha)} = (1-\theta) \,\Delta t \dot{\gamma}^{(\alpha),n} + \theta \Delta t \dot{\gamma}_0 \frac{\tau^{(\alpha),n+1}}{g^{(\alpha)}} \left| \frac{\tau^{(\alpha),n+1}}{g^{(\alpha)}} \right|^{m-1}, \tag{4.42}$$

avec

$$\tau^{(\alpha),n+1} = \boldsymbol{\sigma}^{n+1} : \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} = (\boldsymbol{\sigma}^n + \Delta \boldsymbol{\sigma}) : \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} = \tau^{(\alpha),n} + \Delta \tau^{(\alpha)}, \tag{4.43}$$

où $\tau^{(\alpha),n}$ est la cission résolue du système α à l'incrément temporel précédent et $\Delta \tau^{(\alpha)}$ est l'incrément de cission résolue, calculé par :

$$\Delta \tau^{(\alpha)} = \Delta \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} = \mathbb{C} : (\Delta \boldsymbol{\varepsilon} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_p) : \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} = \Delta \boldsymbol{\sigma}_{el} : \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} - \mathbb{C} : \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_p : \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)}.$$
(4.44)

 $\Delta \sigma_{\rm el}$ correspond à l'incrément de contrainte issu du calcul de propagation élastique, avant qu'une éventuelle étape de correction plastique ait lieu. Or, l'incrément de déformation plastique est défini par l'Equation (4.11), dans laquelle interviennent les incréments des multiplicateurs plastiques $\Delta \gamma^{(\alpha)}$ que l'on cherche à déterminer :

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_p = \sum_{\alpha} \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} \Delta \gamma^{(\alpha)}. \tag{4.45}$$

L'Equation (4.42) devient donc :

$$\Delta \gamma^{(\alpha)} - (1-\theta)\Delta t \dot{\gamma}^{(\alpha),n} - \frac{\theta \Delta t \dot{\gamma}_{0}}{g^{(\alpha)}} \left(\tau^{(\alpha),n} + \Delta \boldsymbol{\sigma}_{el} : \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} - \mathbb{C} : \sum_{\beta} \boldsymbol{\mu}^{(\beta)} \Delta \gamma^{(\beta)} : \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} \right) \times$$

$$\left| \tau^{(\alpha),n} + \Delta \boldsymbol{\sigma}_{el} : \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} - \mathbb{C} : \sum_{\beta} \boldsymbol{\mu}^{(\beta)} \Delta \gamma^{(\beta)} : \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} \right|^{m-1} = 0$$

$$(4.46)$$

Finalement, dans le cas présent où ne considérons que deux systèmes de glissements sans écrouissage $(g^{(\alpha)} = g_0)$, le système à résoudre est :

$$\begin{cases} \Delta \gamma^{(1)} - (1-\theta)\Delta t \dot{\gamma}^{(1),n} - \frac{\theta \Delta t \dot{\gamma}_{0}}{g_{0}} \left(\tau^{(1),n} + \Delta \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{el}} : \boldsymbol{\mu}^{(1)} - \mathbb{C} : \left(\boldsymbol{\mu}^{(1)} \Delta \gamma^{(1)} + \boldsymbol{\mu}^{(2)} \Delta \gamma^{(2)} \right) : \boldsymbol{\mu}^{(1)} \right) \times \\ \left| \tau^{(1),n} + \Delta \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{el}} : \boldsymbol{\mu}^{(1)} - \mathbb{C} : \left(\boldsymbol{\mu}^{(1)} \Delta \gamma^{(1)} + \boldsymbol{\mu}^{(2)} \Delta \gamma^{(2)} \right) : \boldsymbol{\mu}^{(1)} \right|^{m-1} = 0 \\ \Delta \gamma^{(2)} - (1-\theta)\Delta t \dot{\gamma}^{(2),n} - \frac{\theta \Delta t \dot{\gamma}_{0}}{g_{0}} \left(\tau^{(2),n} + \Delta \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{el}} : \boldsymbol{\mu}^{(2)} - \mathbb{C} : \left(\boldsymbol{\mu}^{(1)} \Delta \gamma^{(1)} + \boldsymbol{\mu}^{(2)} \Delta \gamma^{(2)} \right) : \boldsymbol{\mu}^{(2)} \right) \times \\ \left| \tau^{(2),n} + \Delta \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{el}} : \boldsymbol{\mu}^{(2)} - \mathbb{C} : \left(\boldsymbol{\mu}^{(1)} \Delta \gamma^{(1)} + \boldsymbol{\mu}^{(2)} \Delta \gamma^{(2)} \right) : \boldsymbol{\mu}^{(2)} \right|^{m-1} = 0 \end{cases}$$

$$(4.47)$$

Le système d'équations à résoudre défini par l'Equation (4.47) (qui comporte autant d'inconnues que de multiplicateurs plastiques) fait donc intervenir de manière couplée et non linéaire les inconnues. C'est pourquoi sa résolution fait intervenir la recherche du zéro d'une fonction vectorielle ⁵. Une fois que les $\Delta \gamma^{(\alpha)}$ ont pu être déterminés, il est alors possible de calculer la déformation plastique via l'Equation (4.42), la rotation plastique de la maille cristalline à l'aide de l'Equation (4.14), et le nouvel état de contrainte en utilisant la loi de Hooke. Dans notre cas, il a été observé que le paramètre numérique θ n'a qu'une influence limitée sur les résultats pour $0.5 \leq \theta \leq 1$. Nous prendrons $\theta = 1$ dans la suite, rendant la résolution complètement implicite.

Une fois les $\Delta \gamma^{(\alpha)}$ déterminés, l'incrément de déformation plastique est calculé à partir de l'Equation (4.45). L'état de contrainte final σ^{n+1} est calculé de la manière suivante :

$$\boldsymbol{\sigma}^{n+1} = \boldsymbol{\sigma}_{\rm el}^{n+1} - \mathbb{C} : \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_p, \tag{4.48}$$

où $\boldsymbol{\sigma}_{\text{el}}^{n+1}$ correspond à l'état de contrainte calculé de manière purement élastique avec l'Equation (4.39), à l'issu du calcul de la propagation d'onde (où il est supposé $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_p = \mathbf{0}$).

4.3.4.2 Exemple sur un chargement en traction/compression en 0D

Pour cet exemple numérique, nous résolvons le problème décrit par les Equations (4.42) à (4.47) au niveau d'un seul noeud (problème 0D) pour un chargement en déformation imposée. Nous considérons le cas d'un monocristal d'Aluminium AA1050, dont le comportement est défini par $C_{1111}^0 = 106.75$ GPa, $C_{1122}^0 = 60.41$ GPa et $C_{1212}^0 = 28.34$ GPa [201]. De plus, nous ne considérerons pas d'écrouissage dans ce travail, ce qui se traduit par $g^{(\alpha)} = g_0$, g_0 étant la résistance initiale du système de glissement, avec $g_0 = 12.9$ MPa. L'état de déformation uniaxiale imposé $\varepsilon_{\text{load}}$ auquel l'échantillon est soumis est :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{load}} = \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{max}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{4.49}$$

avec $\varepsilon_{\max} = 0.005$, suivi d'une décharge jusqu'à $\varepsilon_{\max} = 0$. De plus, $\dot{\varepsilon} = 10 \text{ s}^{-1}$. Les paramètres du modèle visco-plastique sont $\gamma_0 = 0.001 \text{ s}^{-1}$, $\Delta t = 1.1 \ \mu \text{s}$ et $\theta = 1$. La valeur de $\dot{\varepsilon}$ est fixée de sorte

^{5.} Pour les applications Python, la fonction *scipy.optimize.root* est utilisée. Plusieurs méthodes sont possibles pour cette fonction. Il a été remarqué que la méthode *hybr* (basée sur la méthode de Powell [157]) donne des résultats satisfaisants pour un faible nombre d'inconnues, mais demande des temps de calcul importants lorsque le nombre d'inconnues augmente. Pour un grand nombre d'inconnues, la méthode *df-sane* (basée sur la méthode du résidu spectral [111]) offre un bon compromis entre temps de calcul et convergence des résultats. L'implémentation de la méthode de Newton-Raphson dans *scipy*, classiquement utilisée, ne permet pas de traiter des fonctions vectorielles.

que le comportement ne soit pas quasi-statique. Afin d'illustrer le comportement du modèle viscoplastique, nous ferons varier l'exposant m, pour deux valeurs du premier angle d'Euler $\varphi_1 : 0$ et $\pi/8$, cette deuxième valeur étant celle pour laquelle les termes de couplage du tenseur des rigidités sont maximum (en valeurs absolues, voir Figure 4.3(b)). Les résultats, sous la forme de la cission résolue sur le second système de glissement ⁶ sont présentés sur la Figure 4.6.



FIGURE 4.6 – Cission résolue obtenue sur le deuxième système de glissement avec le modèle viscoplastique. Ici, $\tau^{(2)} < 0$ en traction. (a) Orientation $\varphi_1 = 0$. (b) Orientation $\varphi_1 = \pi/8$.

La Figure 4.6 montre que pour les deux angles considérés, le comportement présente une dépendance à l'exposant m. Au fur et à mesure que ce dernier augmente, le comportement semble se stabiliser vers un comportement parfaitement plastique. Pour les paramètres choisis, l'angle d'Euler φ_1 a une influence limitée pour les exposants m élevés, jouant principalement sur le coefficient directeur de la partie élastique des courbes, et plus faiblement sur les valeurs des paliers.

Maintenant que nous sommes en mesure de faire propager une onde de contrainte dans un matériau, et de déterminer la déformation plastique induite par le passage de cette onde, nous sommes en mesure des calculer les contraintes résiduelles, ce qui fera l'objet de la prochaine section.

4.4 Calcul numérique des contraintes résiduelles

Cette section a pour objectif de détailler le calcul des contraintes résiduelles induites par le choc laser. Les contraintes résiduelles correspondent à un état de contrainte non nul présent dans le matériau alors même que tout chargement extérieur a disparu. Cependant, les contraintes résiduelles sont non nulles si et seulement si la déformation plastique⁷ est non uniforme, i.e. si elle présente un gradient. Le problème est représenté de manière schématique sur la Figure 4.7.

^{6.} En l'absence de rotation, l'état de déformation imposé ne crée aucun cisaillement, et la quantité $\tau^{(1)} = \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}_0^{(1)}$ est nulle.

^{7.} De manière générale, l'hétérogénéité du champ de déformations dites libres est à l'origine de contraintes en l'absence de chargement mécanique extérieur. Les déformations libres sont des déformations n'engendrant en elles-mêmes pas de contraintes. Elles peuvent par exemple être de nature plastique, thermique, ou causées par des changements de phases.



FIGURE 4.7 – Schéma du problème pour la détermination de contraintes résiduelles.

La Figure 4.7 fait apparaître le champ hétérogène de déformations plastiques résiduelles induit par le choc laser responsable des contraintes résiduelles. La détermination des contraintes résiduelles consiste à trouver le champ de déplacement u(x, y) tel que :

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}(x, y) : (\boldsymbol{\varepsilon}(x, y) - \boldsymbol{\varepsilon}_p(x, y)) \\ \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \left(\nabla \boldsymbol{u} + \nabla^T \boldsymbol{u} \right). \\ \boldsymbol{\sigma}.\boldsymbol{n} = \mathbf{0} \quad \operatorname{sur} \quad \partial \Omega_x^- \cup \partial \Omega_x^+ \cup \partial \Omega_y^- \cup \partial \Omega_y^+ = \partial \Omega \\ \boldsymbol{u} = \mathbf{0} \quad \operatorname{en A et B} \end{cases}$$

$$(4.50)$$

Dans l'Equation (4.50), le tenseur des déformations plastiques $\varepsilon_p(x, y)$ provient du calcul de la propagation élasto-plastique, et est donc une donnée d'entrée, de même que le champ des tenseurs de rigidités $\mathbb{C}(x, y)$. De cette manière, il n'est pas nécessaire d'attendre que le calcul de la propagation de l'onde de contrainte atteigne un équilibre statique, i.e. une fois que l'onde de contrainte a quitté le domaine de la simulation grâce aux conditions aux limites non réflectives, et après un certain temps, afin que les contraintes s'équilibrent (~ 20 μ s). Seul le champ de déformations plastiques a besoin d'être stationnaire. Nous donnons au champs de déplacement la forme suivante :

$$\boldsymbol{u} = u_x \boldsymbol{e}_1 + u_y \boldsymbol{e}_2. \tag{4.51}$$

Pour ce problème, les bords de l'échantillon seront considérés comme des surfaces libres, et des encastrements sont imposés aux points A et B^8 . Ainsi :

$$\begin{cases}
Sur \ \partial\Omega_x^- \text{ et } \partial\Omega_x^+ : \begin{cases} \sigma_{11}(x,y) = 0\\ \sigma_{12}(x,y) = 0 \end{cases} \\
Sur \ \partial\Omega_y^- \text{ et } \partial\Omega_y^+ : \begin{cases} \sigma_{22}(x,y) = 0\\ \sigma_{12}(x,y) = 0 \end{cases} \\
En \ A \ \text{ et } B : u_x = u_y = 0
\end{cases}$$
(4.52)

^{8.} Avec ces conditions aux limites, le problème est sur-contraint. Il a été remarqué numériquement que d'autres conditions aux limites (par exemple, une composante de déplacement seulement imposée nulle aux points A et B) peuvent induire des artéfacts numériques sur les bords du domaine. Les conditions ici imposées aux points A et B peuvent mener à des concentrations de contraintes, mais qui seront, par les dimensions choisies, assez loin de l'impact pour ne pas impacter la solution dans son voisinage.

Nous rappelons l'expression de l'opérateur divergence appliqué au tenseur d'ordre 2 des contraintes dans le cas d'une formulation en déformations planes :

$$\operatorname{div}\left(\boldsymbol{\sigma}\right) = \begin{pmatrix} \frac{\partial\sigma_{11}}{\partial x} + \frac{\partial\sigma_{12}}{\partial y}\\ \frac{\partial\sigma_{12}}{\partial x} + \frac{\partial\sigma_{22}}{\partial y} \end{pmatrix}.$$
(4.53)

L'hétérogénéité du champ des tenseurs des rigidités doit également être pris en compte dans la résolution, nous avons donc :

$$\sigma_{ij/q} = C_{ijkl/q} \left(\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{p,kl} \right) + C_{ijkl} \left(\varepsilon_{kl/q} - \varepsilon_{p,kl/q} \right), \tag{4.54}$$

où la notation ./q correspond à la dérivée partielle par rapport à la coordonnée q, ici x ou y. L'Equation (4.54) est également utilisée par Runnels et al. [167], qui utilisent cependant des distributions continues des propriétés mécaniques au niveau des interfaces. Ici, les distributions spatiales quantités C_{ijkl} seront supposées constantes par grain, avec des sauts aux interfaces. L'implémentation des différences finies considérée ne permet pas un raffinement du maillage au niveau des interfaces. Ces grandeurs ne sont donc pas en toute rigueur dérivables au niveau des joints de grains. Les dérivées ne sont donc à considérer qu'au sens numérique, dont les expressions sont données dans l'Equation (4.56). De plus, nous rappelons :

$$\varepsilon_{11} = \frac{\partial u_x}{\partial x}, \quad \varepsilon_{22} = \frac{\partial u_y}{\partial y}, \quad \varepsilon_{12} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right).$$
(4.55)

La résolution du système (4.50) fait donc intervenir les dérivées spatiales premières et secondes du champ de déplacement. Pour cette résolution, la méthodes des différences finies sera utilisée. Ainsi, soit *a* une variable scalaire quelconque, a_{ij} correspondant à $a(x_i, y_j)$ après discrétisation, nous avons, selon les différents domaines identifiés dans la Figure 4.7.

$$\begin{cases} \text{Dans } \Omega : \begin{cases} \left(\frac{\partial a}{\partial x}\right)_{ij} = \frac{a_{i+1,j} - a_{i-1,j}}{2\Delta x} \\ \left(\frac{\partial^2 a}{\partial x^2}\right)_{ij} = \frac{a_{i+1,j} - 2a_{ij} + a_{i-1,j}}{\Delta x^2} \\ \left(\frac{\partial^2 a}{\partial x \partial y}\right)_{ij} = \frac{a_{i+1,j+1} - a_{i-1,j+1} - a_{i+1,j-1} + a_{i-1,j-1}}{4\Delta x \Delta y} \end{cases}$$

$$(4.56)$$

$$\text{Sur } \partial \Omega_x^- : \left(\frac{\partial a}{\partial x}\right)_{ij} = \frac{a_{i+1,j} - a_{ij}}{\Delta x} \\ \text{Sur } \partial \Omega_x^+ : \left(\frac{\partial a}{\partial x}\right)_{ij} = \frac{a_{ij} - a_{i-1,j}}{\Delta x} \end{cases}$$

Les dérivées par rapport à la variable y sur les domaines Ω , $\partial \Omega_y^-$ et $\partial \Omega_y^+$ sont similaires, et s'obtiennent en remplaçant Δx par Δy , et en considérant les variations d'indices sur j et non plus sur i. Les expressions des dérivées secondes ne sont pas précisées au niveau des conditions aux limites car elles ne seront pas utilisées. En effet, les dérivées secondes n'interviennent que dans l'expression de l'équilibre (voir Equation (4.50)₁), qui n'est résolu que sur Ω (la solution sur $\partial\Omega$ est déterminée par les conditions aux limites). De par la forme des tenseurs de Schmid donnés dans l'Equation (4.16), le tenseur des déformations plastiques a la forme générale suivante :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{p} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{p} & \varepsilon_{p,12} & 0\\ \varepsilon_{p,12} & -\varepsilon_{p} & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

$$(4.57)$$

L'écriture de l'équilibre statique donne donc le système suivant :

$$\begin{aligned} C_{1111} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + C_{1122} \frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + C_{1112} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} \right) + C_{1112} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + C_{2212} \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + C_{1212} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} \right) + \\ \left(\frac{\partial C_{1111}}{\partial x} + \frac{\partial C_{1112}}{\partial y} \right) \frac{\partial u_x}{\partial x} + \left(\frac{\partial C_{1122}}{\partial x} + \frac{\partial C_{2212}}{\partial y} \right) \frac{\partial u_y}{\partial y} + \left(\frac{\partial C_{1112}}{\partial x} + \frac{\partial C_{1212}}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) = \\ \frac{\partial \varepsilon_p}{\partial x} \left(C_{1111} - C_{1122} \right) + \frac{\partial \varepsilon_p}{\partial y} \left(C_{1112} - C_{2212} \right) + \varepsilon_p \left(\frac{\partial C_{1111}}{\partial x} - \frac{\partial C_{1122}}{\partial x} + \frac{\partial C_{1112}}{\partial y} - \frac{\partial C_{2212}}{\partial y} \right) + \\ 2 \left(C_{1112} \frac{\varepsilon_{p,12}}{\partial x} + C_{1212} \frac{\partial \varepsilon_{p,12}}{\partial y} \right) + 2 \varepsilon_{p,12} \left(\frac{\partial C_{1112}}{\partial x} + \frac{\partial C_{1212}}{\partial y} \right) ; \\ C_{1122} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + C_{2222} \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + C_{2212} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} \right) + C_{1112} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + C_{2212} \frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + C_{1212} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} \right) + \\ \left(\frac{\partial C_{1111}}{\partial x} + \frac{\partial C_{1112}}{\partial y} \right) \frac{\partial u_x}{\partial x} + \left(\frac{\partial C_{1122}}{\partial x} + \frac{\partial C_{2212}}{\partial y} \right) \frac{\partial u_y}{\partial y} + \left(\frac{\partial C_{1112}}{\partial x} + \frac{\partial C_{1212}}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) = \\ \frac{\partial \varepsilon_p}{\partial y} \left(C_{1122} - C_{2222} \right) + \frac{\partial \varepsilon_p}{\partial x} \left(C_{1112} - C_{2212} \right) + \varepsilon_p \left(\frac{\partial C_{1122}}{\partial y} - \frac{\partial C_{2222}}{\partial y} + \frac{\partial C_{1112}}{\partial x} - \frac{\partial C_{2212}}{\partial y} \right) + \\ 2 \left(C_{2212} \frac{\varepsilon_{p,12}}{\partial y} + C_{1212} \frac{\partial \varepsilon_{p,12}}{\partial x} \right) + 2 \varepsilon_{p,12} \left(\frac{\partial C_{2212}}{\partial y} + \frac{\partial C_{1212}}{\partial y} \right) \frac{\partial u_y}{\partial y} + \left(\frac{\partial C_{1112}}{\partial x} - \frac{\partial C_{2212}}{\partial y} \right) + \\ 2 \left(C_{2212} \frac{\varepsilon_{p,12}}{\partial y} + C_{1212} \frac{\partial \varepsilon_{p,12}}{\partial x} \right) + 2 \varepsilon_{p,12} \left(\frac{\partial C_{2212}}{\partial y} + \frac{\partial C_{1212}}{\partial x} \right). \end{aligned}$$

$$(4.58)$$

Nous rappelons les relations suivantes :

$$\begin{cases}
\sigma_{11} = C_{1111} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} - \varepsilon_{p,11} \right) + C_{1122} \left(\frac{\partial u_y}{\partial y} - \varepsilon_{p,22} \right) + C_{1112} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} - 2\varepsilon_{p,12} \right) \\
\sigma_{22} = C_{1122} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} - \varepsilon_{p,11} \right) + C_{2222} \left(\frac{\partial u_y}{\partial y} - \varepsilon_{p,22} \right) + C_{2212} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} - 2\varepsilon_{p,12} \right) \\
\sigma_{12} = C_{1112} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} - \varepsilon_{p,11} \right) + C_{2212} \left(\frac{\partial u_y}{\partial y} - \varepsilon_{p,22} \right) + C_{1212} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} - 2\varepsilon_{p,12} \right).$$
(4.59)

La discrétisation se fait alors en appliquant les expressions des dérivées spatiales de l'Equation (4.56) au niveau des conditions aux limites correspondantes. Il est alors possible d'écrire le système de l'Equation (4.58) sous la forme suivante :

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{f} \iff \begin{pmatrix} \boldsymbol{M}_{11} & \boldsymbol{M}_{12} \\ \boldsymbol{M}_{21} & \boldsymbol{M}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{U}_x \\ \boldsymbol{U}_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{f}_1 \\ \boldsymbol{f}_2 \end{pmatrix}, \qquad (4.60)$$

avec $U_x = (u_{x,11} \ u_{x,12} \dots u_{x,1N_y} \ u_{x,21} \dots u_{x,ij} \dots u_{x,N_x1} \dots u_{x,N_xN_y})^T$ et U_y défini de manière similaire. Les matrices M_{IJ} pour $I, J \in \{1, 2\} \times \{1, 2\}$ sont construites avec les paramètres $\Delta x, \Delta y$ et les coefficients C_{klmn} . Les vecteurs f_1 et f_2 sont également construits avec $\Delta x, \Delta y, C_{klmn}$ mais également les valeurs des composantes du tenseur des déformations plastiques évalué à un nœud donné $\varepsilon_{p,ij}$. Ils correspondent aux membres de droite des équations du système (4.58). Pour aller plus loin, nous pouvons préciser les expressions générales des termes suivants, pour des indices i et j tels que le point (x_i, y_j) est dans Ω :

$$\begin{pmatrix} (\mathbf{M}_{11}\mathbf{U}_{x})_{(j-1)N_{x}+i} \\ (\mathbf{M}_{21}\mathbf{U}_{x})_{(j-1)N_{x}+i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & h_{14} & h_{15} & h_{16} & h_{17} & h_{18} & h_{19} \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} & h_{34} & h_{35} & h_{36} & h_{37} & h_{38} & h_{39} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{x,i-1j-1} \\ u_{x,ij-1} \\ u_{x,ij} \\ u_{x,i+1j} \\ u_{x,i+1j+1} \end{pmatrix}$$
(4.61)
$$\begin{pmatrix} (\mathbf{M}_{12}\mathbf{U}_{y})_{(j-1)N_{x}+i} \\ (\mathbf{M}_{22}\mathbf{U}_{y})_{(j-1)N_{x}+i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_{21} & h_{22} & h_{23} & h_{24} & h_{25} & h_{26} & h_{27} & h_{28} & h_{29} \\ h_{41} & h_{42} & h_{43} & h_{44} & h_{45} & h_{46} & h_{47} & h_{48} & h_{49} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{y,i-1j-1} \\ u_{y,ij-1} \\ u_{y,ij} \\ u_{y,i-1j} \\ u_{y,i-1j+1} \\ u_{y,i+1j+1} \end{pmatrix}$$
(4.62)

Les coefficients h_{ij} sont les suivants :

$$\begin{split} h_{11} &= \frac{C_{1112}}{2\Delta x \Delta y} \\ h_{12} &= \frac{C_{1212}}{\Delta y^2} - \frac{1}{2\Delta y} \left(\left(\frac{\partial C_{1112}}{\partial x} \right)_{ij} + \left(\frac{\partial C_{1212}}{\partial y} \right)_{ij} \right) \\ h_{13} &= -\frac{C_{1112}}{2\Delta x \Delta y} \\ h_{14} &= \frac{C_{1111}}{\Delta x^2} - \frac{1}{2\Delta x} \left(\left(\frac{\partial C_{1111}}{\partial x} \right)_{ij} + \left(\frac{\partial C_{1112}}{\partial y} \right)_{ij} \right) \\ h_{15} &= -\frac{2C_{1111}}{\Delta x^2} - \frac{2C_{1212}}{\Delta y^2} \\ h_{16} &= \frac{C_{1112}}{\Delta x^2} - \frac{2C_{1212}}{\Delta y^2} \\ h_{16} &= \frac{C_{1112}}{\Delta x^2} + \frac{1}{2\Delta x} \left(\left(\frac{\partial C_{1111}}{\partial x} \right)_{ij} + \left(\frac{\partial C_{1112}}{\partial y} \right)_{ij} \right) \\ h_{17} &= -\frac{C_{1112}}{2\Delta x \Delta y} \\ h_{18} &= \frac{C_{1212}}{\Delta y^2} + \frac{1}{2\Delta y} \left(\left(\frac{\partial C_{1112}}{\partial x} \right)_{ij} + \left(\frac{\partial C_{1212}}{\partial y} \right)_{ij} \right) \\ h_{19} &= \frac{C_{1112}}{2\Delta x \Delta y} \\ h_{19} &= \frac{C_{1112}}{2\Delta x \Delta y} \end{split}$$

$$\begin{split} h_{31} &= \frac{C_{1122}}{4\Delta x \Delta y} + \frac{C_{1212}}{4\Delta x \Delta y} \\ h_{32} &= \frac{C_{2212}}{\Delta y^2} - \frac{1}{2\Delta y} \left(\left(\frac{\partial C_{1212}}{\partial x} \right)_{ij} + \left(\frac{\partial C_{2212}}{\partial y} \right)_{ij} \right) \\ h_{33} &= -\frac{C_{1122}}{4\Delta x \Delta y} - \frac{C_{1212}}{4\Delta x \Delta y} \\ h_{34} &= \frac{C_{1112}}{\Delta x^2} - \frac{1}{2\Delta x} \left(\left(\frac{\partial C_{1112}}{\partial x} \right)_{ij} + \left(\frac{\partial C_{1122}}{\partial y} \right)_{ij} \right) \\ h_{35} &= -\frac{2C_{1112}}{\Delta x^2} - \frac{2C_{2212}}{\Delta y^2} \\ h_{36} &= \frac{C_{1112}}{\Delta x^2} - \frac{1}{2\Delta x} \left(\left(\frac{\partial C_{1112}}{\partial x} \right)_{ij} + \left(\frac{\partial C_{1122}}{\partial y} \right)_{ij} \right) \\ h_{37} &= -\frac{C_{1122}}{4\Delta x \Delta y} - \frac{C_{1212}}{4\Delta x \Delta y} \\ h_{38} &= \frac{C_{2212}}{\Delta y^2} + \frac{1}{2\Delta y} \left(\left(\frac{\partial C_{1112}}{\partial x} \right)_{ij} + \left(\frac{\partial C_{2212}}{\partial y} \right)_{ij} \right) \\ h_{39} &= \frac{C_{1122}}{4\Delta x \Delta y} + \frac{C_{1212}}{4\Delta x \Delta y} \\ h_{39} &= \frac{C_{1122}}{4\Delta x \Delta y} + \frac{C_{1212}}{4\Delta x \Delta y} \\ \end{split}$$

Les conditions aux limites posées dans l'Equation (4.52) sont incorporées dans le système de l'Equation (4.60) aux lignes correspondantes. La résolution numérique des contraintes résiduelles se fait donc via un système d'équations aux dérivées partielles, donc la résolution nécessite l'inversion de la matrice M. Cette matrice est de taille conséquente, mais est de nature creuse. Suivant les solutions techniques à disposition, des précautions doivent être prises afin d'optimiser l'usage mémoire permettant non seulement l'inversion de cette matrice, mais également son stockage. Plutôt que de procéder à l'inversion directe de la matrice (.i.e. de calculer $X = M^{-1}f$), la méthode *scipy.sparse.linalg.spsolve* de Python est utilisée avec la matrice M et le vecteur f. Cette méthode tire avantage de la nature creuse de la matrice M pour résoudre le système d'équations en déterminant un arrangement des lignes de la matrice permettant d'optimiser la résolution [57].

Toutes les conditions sont maintenant réunies pour pouvoir procéder à des simulations complètes, permettant de calculer la propagation de l'onde de contrainte dans un matériau cristallin, de déterminer le champ de déformation plastique induit, et les contraintes résiduelles qui en découlent.

4.5 Microstructures simples : cas d'un monocristal et d'un bicristal

Nous présentons dans cette section des résultats numériques obtenus avec les développements précédents. Une première partie de cette section présentera des résultats pour des microstructures simples. L'importance de la nature aléatoire des microstructures polycristallines (au travers de la forme et l'orientation des grains) sera étudiée dans une seconde partie. Cette dernière s'attachera donc à présenter des résultats dont il sera possible de tirer des conclusions sur le comportement global du LSP, via un traitement statistique des simulations.

4.5.1 Cas d'un monocristal

Nous considérons dans un premier temps le cas d'un monocristal, qui permettra d'étudier l'influence de l'orientation du cristal sur le champ de déformation plastique.

Paramètres des simulations Nous considérerons un domaine rectangulaire de dimensions $L_x = L_y = 3$ mm. Les nombres de noeuds dans les directions x et y, notées N_x et N_y respectivement sont $N_x = N_y = 600$.

Le chargement laser est modélisé par des profils spatiaux et temporels de pression. Ces derniers sont tirés des travaux de [115] et illustrés avec une pression normalisée dans la Figure 4.8. Cette condition aux limites est appliquée sur la frontière Ω_x^- (voir Figure 4.7). Le diamètre d de la tâche laser est fixé à d = 0.5 mm, afin de se rapprocher des conditions expérimentales du LSP.



FIGURE 4.8 – Modélisation du chargement en pression issu de l'impact laser. La pression est normalisée. (a) Profil temporel. (b) Profil spatial.

Dans ce qui suivra, un paramètre d'étude sera le ratio de la taille moyenne des grains sur le diamètre de la tache laser. Il est important de noter que le profil spatial présenté dans la Figure 4.8 est idéalisé pour ce diamètre de taille laser. Le profil d'intensité des lasers utilisés pour le LSP est beaucoup moins uniforme. Une instrumentation optique précise est nécessaire afin d'obtenir un profil spatial d'intensité du laser lissé pour des tâches dont le diamètre est de l'ordre de quelques millimètres. Par ailleurs, l'amplitude de pression sera de P = 1 GPa. Le matériau utilisé est inspiré de l'Aluminium AA1050⁹ dont les paramètres sont [201] :

TABLE 4.1 – paramètres élasto-visco-plastiques pour l'Aluminium AA1050 [201]

C_{1111} (GPa)	C_{1122} (GPa)	C_{1212} (GPa)	$\dot{\gamma}_0 \; (\mathrm{s}^{-1})$	m	g_0 (MPa)
106.75	60.41	28.34	0.001	16	12.9

La valeur de l'exposant m (ou 1/m dans la référence citée) choisie est différente de celle donnée

^{9.} Le comportement de l'Aluminium est utilisé pour les constantes matériaux, mais pas pour la modélisation de la microstructure, ni pour la géométrie des systèmes de glissement.

dans les travaux de Zhang et al. [201] (m = 50). Pour la résolution numérique actuelle et l'amplitude du chargement laser, des grandes valeurs de l'exposant du modèle visco-plastique de l'Equation (4.20) empêchent l'algorithme de converger. La valeur de m = 16 est donc choisie de sorte que les simulations convergent.

Le calcul des contraintes résiduelles se base sur le champ des déformations plastiques résiduelles. Ce dernier sera généré dans notre cas par un unique impact. Le calcul des contraintes résiduelles correspondant en général à un échantillon épais, il faut s'assurer que les déformations plastiques ne sont pas modifiées par des réflexions d'ondes causées par les bords du domaine numérique. Pour cela, nous utilisons des conditions aux limites non réflectives dans le calcul de la propagation élastoplastique, permettant à l'onde de contrainte de quitter le domaine spatial de la simulation comme si elle se propageait à l'infini. Ces conditions aux limites correspondent à une interpolation à l'ordre zéro des inconnues sur les frontières du domaine (voir Figure 4.7) [119] :

$$\begin{cases} \operatorname{Sur} \partial \Omega_x^+ : U_{N_x j} = U_{N_x - 1j} \\ \operatorname{Sur} \partial \Omega_y^- : U_{i0} = U_{i1} \\ \operatorname{Sur} \partial \Omega_y^+ : U_{iN_y} = U_{iN_y - 1} \end{cases}$$
(4.65)

où U reprend la définition donnée dans l'Equation (4.28). Nous pouvons maintenant présenter les résultats des simulations.

Champ des déformations plastiques de la maille cristalline Nous commençons par présenter les résultats sous la forme de la déformation plastique cumulée globale γ , définie telle que

$$\gamma = \sum_{\alpha} \left| \gamma^{(\alpha)} \right|, \tag{4.66}$$

dont les distributions sont présentées sur la Figure 4.9 pour deux orientations de l'échantillon, $\varphi_1 = 0$ et $\varphi_1 = \pi/6$, afin d'illustrer comment l'orientation seule d'un monocristal peut influencer les résultats. A ces résultats sont ajoutés des lignes représentant les directions de glissement des systèmes de glissement, afin de rendre l'interprétation plus claire. L'orientation de ces lignes n'a pas été calée sur les cartographies de la Figure 4.9, mais a été tracée de sorte à respecter les angles des systèmes de glissement avec la direction e_1 .

4.5. MICROSTRUCTURES SIMPLES : CAS D'UN MONOCRISTAL ET D'UN BICRISTAL



FIGURE 4.9 – Déformation plastique cumulée globale γ (visuel agrandi) pour un impact unique sur un monocristal. Les lignes blanches en tirets correspondent aux directions de glissement du système de glissement 1, et les lignes blanches en tirets/points correspondent aux directions de glissement du système de glissement 2. (a) Orientation du cristal définie par $\varphi_1 = 0$. (b) Orientation du cristal définie par $\varphi_1 = \pi/6$.

La Figure 4.9 montre que l'orientation du cristal par rapport à la direction du choc a une forte influence sur la distribution des déformations plastiques, mais une influence limitée sur les valeurs de cette dernière. Les Figures 4.9(a) et 4.9(b) font toutes deux apparaître des zones de fortes déformations plastiques au bords de l'impact, ce qui est dû à un fort cisaillement entre la zone comprimée de l'impact et la zone libre. Il est intéressant de noter que chaque figure présente des lignes de localisation de la déformation plastique issues des bords de l'impact. Le schéma formé par ces lignes est diffèrent entre l'orientation $\varphi_1 = 0$ (où il est symétrique) et $\varphi_1 = \pi/6$ (où il n'est pas symétrique). Ces lignes peuvent s'interpréter comme les directions des systèmes de glissement, qui sont activés par des fortes valeurs de cission résolue, donc de cisaillement. C'est pourquoi elles ont pour origines les bords de l'impact, où l'on trouve une forte contrainte de cisaillement par rapport au centre de l'impact (ce dernier étant dans un état proche de la compression pure, alors que du cisaillement s'y ajoute sur les bords de la tache laser). Il est important de noter qu'un système de glissement dans une position de référence et ayant subi une rotation de 90° génèrent la même quantité de déformation plastique en valeur absolue :

$$\left|\boldsymbol{\sigma}:\boldsymbol{\mu}^{(\alpha)}\right| = \left|\boldsymbol{\sigma}:\boldsymbol{R}_{90}\cdot\boldsymbol{\mu}^{(\alpha)}\cdot\boldsymbol{R}_{90}^{T}\right|,\tag{4.67}$$

où \mathbf{R}_{90} est la matrice de rotation correspondant à la rotation définie par le premier angle d'Euler valant 90°, les autres étant nuls. C'est pourquoi à chaque manifestation d'un système de glissement correspondent deux lignes : une portée par la vraie direction de glissement, et une autre perpendiculaire. Enfin, la contribution à la déformation plastique de la composante perpendiculaire d'un système de glissement est de signe opposé à la composante « principale », comme illustré sur la Figure 4.10, qui présente la distribution du multiplicateur plastique $\gamma^{(2)}$ associé au système de glissement 2.



FIGURE 4.10 – Distribution de la quantité $\gamma^{(2)}$ (visuel agrandi) pour un impact unique sur un monocristal avec $\varphi_1 = \pi/6$. Les lignes en tirets noirs correspondent aux directions de glissement du système de glissement 2.

Cette analyse peut être résumée sur le schéma de la Figure 4.11.



FIGURE 4.11 – Représentation théorique des lignes correspondant aux directions de glissement. (a) Orientation du cristal définie par $\varphi_1 = 0$. (b) Orientation du cristal définie par $\varphi_1 = \pi/6$.

La Figure 4.11 présente de manière schématique les directions de glissement des systèmes de glissement, selon lesquelles se concentre la déformation plastique du cristal. Les bords de la tache laser sont soumis à un fort cisaillement, la déformation plastique y est donc particulièrement élevée. C'est pourquoi les bandes de déformation plastique ont leurs origines sur les bords de la tache laser. Pour un système de glissement, la déformation plastique a lieu sur deux lignes perpendiculaires, en vertu de l'Equation (4.67). Dans le cas de l'orientation $\varphi_1 = 0$ et du premier système de glissement, seule une ligne est représentée, l'autre étant confondue avec la surface de l'échantillon. Les directions du deuxième système de glissement sont obtenues en introduisant un angle de $\pi/4$ avec le premier système. Dans le cas de l'orientation $\varphi_1 = \pi/6$, la configuration est obtenue en faisant tourner les lignes de l'orientation $\varphi_1 = 0$ d'un angle de $\pi/6$ autour d'un axe hors plan passant par leurs origines. Ces représentations correspondent exactement aux observations de la Figure 4.9.

Nous pouvons également regarder la propagation de l'onde de contrainte au travers de la vitesse de déformation plastique cumulée $\dot{\gamma}$ dans le cas du monocristal orienté avec $\varphi_1 = \pi/6$, pour différents instants de la propagation. Cette propagation illustrée sur la Figure 4.12 au travers du logarithme décimal de la vitesse de déformation plastique cumulée $(\log_{10} (\dot{\gamma}))$ afin de pouvoir comparer les cartographies aux différents instants avec une même échelle. Nous pouvons notamment vérifier l'ordre de grandeur de cette vitesse de déformation $(10^5 - 10^6 \text{ s}^{-1})$ qui correspond aux ordres de grandeur du grenaillage laser. Ces cartographies font apparaître les motifs déjà observés sur la Figure 4.9(b), avec en plus un front de vitesse de déformation semi-circulaire s'éloignant de la zone de l'impact.



FIGURE 4.12 – Cartographies du logarithme décimal de la vitesse de déformation plastique cumulée $\dot{\gamma}$ (s⁻¹) à différents instants, pour le monocristal orienté avec $\varphi_1 = \pi/6$. (a) t = 29.9 ns. (b) t = 104.5 ns. (c) t = 179.1 ns.

Il est également intéressant d'étudier les résultats pour la rotation de la maille cristalline induite par le choc laser. En effet, cette rotation est un marqueur de la déformation plastique. La possibilité de mesurer ces rotations par EBSD constitue une possible comparaison expérimentale. Un tel travail expérimental n'est cependant par encore réalisé. La Figure 4.13 présente les cartographies des rotations, en degré, pour les orientations $\varphi_1 = 0$ et $\varphi_1 = \pi/6$.

4.5. MICROSTRUCTURES SIMPLES : CAS D'UN MONOCRISTAL ET D'UN BICRISTAL



FIGURE 4.13 – Rotations en degré de la maille cristalline (visuel agrandi) pour un impact unique sur un monocristal. (a) Orientation du cristal définie par $\varphi_1 = 0$. (b) Orientation du cristal définie par $\varphi_1 = \pi/6$.

Champ des contraintes résiduelles Nous présentons sur la Figure 4.14 les contraintes résiduelles induites par le champ de déformations plastique dont la déformation plastique cumulée globale est présentée en Figure 4.9.



FIGURE 4.14 – Contraintes résiduelles σ_{22} (MPa) pour un impact unique sur un monocristal (visuel agrandi). Les lignes noires en tirets correspondent aux directions de glissement du système de glissement 1, et les lignes noires en tirets/points correspondent aux directions de glissement du système de glissement 2. (a) Orientation du cristal définie par $\varphi_1 = 0$. (b) Orientation du cristal définie par $\varphi_1 = \pi/6$.

Nous pouvons remarquer immédiatement que la distribution des contraintes résiduelles dans le monocristal pour les deux orientations suit également les lignes de glissement mises en avant dans la Figure 4.11. Les deux cartographies de la Figure 4.14 présentent des concentrations de contraintes sur les bords de l'impact, là où la déformation de cisaillement est maximale. Avant d'être en mesure de tirer des conclusions sur l'influence d'une microstructure sur les contraintes résiduelles, la répartition de ces dernières est déjà fortement impactée par l'orientation des grains. Cette influence est observée

plus en détail sur la Figure 4.15, où les profils spatiaux des contraintes résiduelles en fonction de la profondeur au centre de l'impact (y = 0) sont présentés.



FIGURE 4.15 – Profils spatiaux des contraintes résiduelles dans un monocristal en fonction de la profondeur, pour une ligne correspondant à l'axe de l'impact laser (y = 0), pour des orientations cristallines telles que $\varphi_1 = 0$ et $\varphi_1 = \pi/6$.

La Figure 4.15 présente l'influence de l'orientation cristalline du grain des contraintes résiduelles en profondeur, au centre de l'impact. Ces profils de contraintes pour les angles $\varphi_1 = 0$ et $\varphi_1 = \pi/6$ présentent les mêmes tendances, avec une influence de l'orientation prononcée proche de la surface $(x \le 0.5 \text{ mm})$. Bien qu'étant du même ordre de grandeur, les contraintes pour $\varphi_1 = 0$ y présentent un pic légèrement en traction supérieur au profil pour $\varphi_1 = \pi/6$. La profondeur affectée par les contraintes résiduelles de compression est cependant plus faible avec l'orientation $\varphi_1 = \pi/6$, qui est une grandeur pouvant caractériser l'efficacité du traitement par choc laser.

4.5.2 Cas d'un bicristal

Un cas intermédiaire entre le monocristal et le polycristal est celui du bicristal (déjà étudié par Vukelić et al. [189]¹⁰). Il permet d'étudier dans un cas simple l'effet d'une interface (ici orientée de 45° avec la surface) sur les déformations plastiques et contraintes résiduelles induites à la suite d'un impact. Ce cas permet de présenter certains comportements à l'interface, sans que ceux-ci soient « noyés » dans une microstructure plus dense. La Figure 4.16 présente la microstructure choisie.

^{10.} Il convient cependant de remarquer que ces auteurs précisent utiliser un modèle Eléments Finis 2D, tout en considérant de multiples systèmes de glissement qui peuvent potentiellement engendrer un état de déformation 3D.

4.5. MICROSTRUCTURES SIMPLES : CAS D'UN MONOCRISTAL ET D'UN BICRISTAL



FIGURE 4.16 – Distribution des orientations cristallines dans le cas d'un bicristal. Partie bleue : $\varphi_1 = 0$. Partie marron : $\varphi_1 = \pi/6$.

De manière similaire, nous commençons par présenter la déformation plastique cumulée induite dans le bicristal. Ces résultats sont présentés dans la Figure 4.17.



FIGURE 4.17 – Déformation plastique cumulée globale γ (visuel agrandi) pour un impact unique sur un bicristal. La ligne en pointillé marque l'interface entre les deux cristaux.

Le schéma de la Figure 4.11 peut être utilisé pour interpréter les résultats de la Figure 4.17. En effet, le motif de la déformation plastique cumulée dans la partie correspondant à $\varphi_1 = 0$ est celui de la Figure 4.9(a), puis devient celui de la Figure 4.9(b) de l'autre côté de l'interface. Une légère concentration de déformation plastique au niveau du joint de grain rend ce dernier visible. Les contraintes résiduelles dans ce cas peuvent être calculées, et sont présentées sur la Figure 4.18.



FIGURE 4.18 – Contraintes résiduelles σ_{22} (MPa) pour un impact unique sur un bicristal (visuel agrandi).

Des commentaires similaires à ceux de la Figure 4.17 sur la construction du profil des contraintes résiduelles peuvent être faits pour la Figure 4.18 : la distribution des contraintes résiduelles reflète celle de la déformation plastique, avec ses bandes de localisation. Un phénomène singulier apparaît cependant sous la forme d'une concentration de contrainte en traction au niveau du joint de grain. D'autres tests numériques (non présentés dans ce manuscrit) montrent que les niveaux de contraintes atteints sur ce joint de grain ne changent pas pour des maillages de plus en plus fins une fois que la convergence est atteinte. Cette concentration de contrainte est particulièrement marquée pour des joints de grains n'étant ni horizontaux, ni verticaux. Par ailleurs, cette concentration n'a donc plus d'effet sur les propriétés élastiques, seulement sur la plasticité au travers des tenseurs de Schmid). L'origine de ce phénomène semble être de nature numérique. Ces observations ne sont pas en accord avec les travaux de Vukelić et al. [189], qui obtiennent une distribution des rotations de la maille cristalline (et donc de la déformation plastique) discontinue au niveau du joint de grain, mais une distribution des contraintes résiduelles sans influence apparente du joint de grain.

4.6 Déformations plastiques et contraintes résiduelles induites par choc laser dans un polycristal

4.6.1 Effet de la microstructure

Paramètres des simulations Cette sous-section présentera les résultats des simulations numériques dans le cas d'un polycristal. L'objectif est ici d'illustrer l'influence d'une fine microstructure sur les champs résiduels causés par le passage de l'onde de contrainte. A cet effet, deux simulations seront réalisées sur deux microstructure différentes, qui ne varieront que par le nombre, la position et la forme des grains. Tous les autres paramètres sont rigoureusement identiques à ceux de la Section 4.5.1. Le nombre moyen de grain sera pris égal à $\eta = 6000$. Une telle valeur permet d'obtenir une taille moyenne de grain (Equation (4.4)) de 40 μ m. Nous avons donc en moyenne 12 grains à l'intérieur de la tache laser. Afin d'augmenter le maillage à l'intérieur des grains, le nombre de noeuds est maintenant $N_x = N_y = 1000$. Les deux microstructures utilisées ici sont représentées sur la Figure 4.19.



FIGURE 4.19 – Distribution du premier angle d'Euler φ_1 (rad) utilisées pour les simulations. (a) Microstructure 1. (b) Microstructure 2.

De manière similaire aux résultats présentés pour les monocristaux aux orientations différentes, nous allons présenter les champs mécaniques obtenus avec les microstructures de la Figure 4.19 afin d'illustrer l'influence que ces dernières peuvent avoir ¹¹.

Champ des déformations plastiques Nous présentons dans un premier temps sur la Figure 4.20 la déformation plastique cumulée globale γ dans le cas des deux microstructures de la Figure 4.19.



FIGURE 4.20 – Distribution de la déformation plastique cumulée globale γ . Les lignes blanches représentent le masque de la microstructure. (a) Microstructure 1. (b) Microstructure 2.

Les résultats de la Figure 4.20 montrent que la distribution de la déformation plastique cumulée

^{11.} Concernant les aspects numériques, sur une station de travail contenant 20 coeurs, 40 processeurs logiques et 64 Go de RAM, un calcul de propagation de l'onde de contraintes dans une microstructure pour les paramètres considérés dure environ trois heures. Il en est de même pour le calcul des contraintes résiduelles. Aucune opération de parallélisation n'a été effectuée sur ces calculs.

globale semble refléter la distribution géométrique des grains (à l'image des résultats du bicristal). Ce résultat n'est pas surprenant, dans la mesure où l'orientation des grains influence directement les tenseurs de Schmid des systèmes de glissement, conduisant a ces valeurs de déformation plastique discontinue d'un grain à l'autre. De fortes valeurs de déformation plastique cumulée globale sont toujours présentes au niveau des bords de l'impact laser. Par ailleurs, les distribution des déformations plastiques semblent également faire apparaître de multiples bandes de localisation, se propageant radialement depuis les bords de l'impact laser. De plus, une certaine concentration de la déformation plastique semble avoir lieu au niveau des joints de grains. Il est difficile d'interpréter cette observation, tant elle dépend de nombreux facteurs : orientation des grains, état de contrainte local, comportement des grains voisins, etc. Les microstructures utilisées en entrée des simulations étant différentes, les champs de la Figure 4.20 le sont localement, mais les deux simulations sont similaires d'un point de vue global. Cette observation semble suggérer que pour une taille de grain assez fine devant celle de la tache laser, le champ des déformations plastiques cumulées change peu d'une microstructure à une autre de manière générale. Nous illustrons un peu plus cela avec la Figure 4.21, qui présente la distribution du 1er angle d'Euler φ_1 et de déformation plastique cumulée γ en profondeur selon le centre de l'impact.



FIGURE 4.21 – Différences entre les deux microstructures pour des profils en profondeur (y = 0). (a) 1er angle d'Euler φ_1 . (b) Déformation plastique cumulée γ .

De manière similaire à la Figure 4.12, nous pouvons présenter l'évolution de l'onde de vitesse de déformation plastique cumulée, dont la Figure 4.22 présente le logarithme décimal $(\log_{10} (\dot{\gamma}))$ par soucis d'uniformité de l'échelle dans la microstructure de la Figure 4.20(a). Le front d'onde s'y propage de manière uniforme, sans que le motif de la vitesse de déformation plastique cumulée y dessine un motif particulier, dénotant une certaine homogénéité de la propagation. Nous pouvons cependant noter l'apparition nette de grains de la microstructure, en particulier sur la Figure 4.22(c).



(c)

FIGURE 4.22 – Cartographies du logarithme décimal de la vitesse de déformation plastique cumulée $\dot{\gamma}$ (s⁻¹) à différents instants dans la microstructure de la Figure 4.20(a). Les lignes noires représentent le masque de la microstructure. (a) t = 43.7 ns. (b) t = 123.6 ns. (c) t = 180.0 ns.

Champ des contraintes résiduelles Dans la continuité de l'analyse, nous montrons maintenant sur la Figure 4.23 les contraintes résiduelles induites dans les microstructures.



FIGURE 4.23 – Distribution des contraintes résiduelles σ_{22} (MPa). Les lignes noires représentent le masque de la microstructure. (a) Microstructure 1. (b) Microstructure 2.

Des constats similaires à ceux de la Figure 4.20 peuvent être faits pour la Figure 4.23. La distribution des contraintes résiduelles reflète directement la distribution des grains de la microstructure, et varie donc d'une microstructure à l'autre.

Une autre manière de représenter les résultats est de calculer la moyenne des contraintes *dans* chaque grain. Les noeuds d'un grain se voient donc affectés la valeur de la contrainte moyennée sur l'ensemble des noeuds du grain. De cette manière, le comportement au joint de grain est quelque peu effacé, et cette vision se rapproche plus des résultats donnés par une analyse par diffraction des rayons X, où des champs moyens par grains diffractant sont mesurés. Pour les deux microstructures, les résultats de ce post-traitement est donné dans la Figure 4.24.



FIGURE 4.24 – Distribution des contraintes résiduelles σ_{22} (MPa) moyennées par grains. Les lignes noires représentent le masque de la microstructure. (a) Microstructure 1. (b) Microstructure 2.

Les résultats de la Figure 4.24 apportent peu d'informations par rapport à la Figure 4.23, mais rendent son interprétation plus claire. Notamment, une zone de contraintes résiduelles de compression est visible, mais n'est pas directement en surface. Ce dernier point peut être illustré plus en détail en traçant la distribution des contraintes en surface pour les résultats moyennés par grain (Figure 4.24).



FIGURE 4.25 – Distribution des contraintes résiduelles σ_{22} (MPa) moyennées par grains. (a) En surface (x = 0). (b) En profondeur (y = 0).

La Figure 4.25 fait apparaître que pour les microstructures considérées, les résultats en surface et en profondeur sont relativement proches, et semblent présenter le même comportement moyen, tout en différant par leurs fluctuations. Ces différences de fluctuations peuvent néanmoins revêtir une certaine importance, dans la mesure où le comportement en fatigue est sensible au cas le plus défavorable. Une fluctuation amenant un état de contraintes en traction pour une microstructure par rapport à une autre peut donc en théorie mener à un différent comportement en fatigue. Les contraintes résiduelles sont en traction sur le bord de la tache (Figure 4.25(a)), en conséquence de l'équilibrage des contraintes sur l'ensemble du domaine. Cette présence de contraintes en traction est indépendante du ratio d/L_y , et peut être observée également pour des modèles macroscopiques (voir par exemple Morin et al. [133]). Si les contraintes présentées sont en compression au centre de la tache en surface, elle ne le sont que sur une épaisseur très faible (~ 0.1 mm), avant de passer brièvement en traction à $x \sim 0.2$ mm (Figure 4.25(b)). Le profil de contraintes résiduelles en profondeur présente néanmoins une zone nettement en compression le long du centre de l'impact (0.25 mm $\leq x \leq 0.75$ mm).

La conclusion de cette section est donc que la prise en compte d'une microstructure a une influence majeure sur les champs mécaniques résiduels, dans la mesure où une microstructure donnée influence directement la distribution des contraintes résiduelles obtenues. Cependant, le rôle du rapport entre le taille moyenne des grains et la taille de la tache laser doit encore être établi. Cet aspect fera l'objet de la section suivante.

4.6.2 Approche statistique des simulations en plasticité cristalline

Cette partie a pour objectif de présenter des résultats de simulations visant à caractériser statistiquement les champs mécaniques issus des simulations en champ complet sur des polycristaux. La méthode sera d'abord présentée pour une microstructure avec des grains de taille moyenne $d_{grain} = 40$ μ m, puis elle sera utilisée pour étudier l'influence de la taille moyenne des grains sur les champs mécaniques.

4.6.2.1 Description de l'approche statistique

Comme illustré par les Figures 4.20 et 4.23, la nature aléatoire des microstructures générées et utilisées dans les simulations influent grandement sur les résultats. Afin de pouvoir quantifier l'influence de la prise en compte d'une microstructure sur les différents champs mécaniques, nous pouvons utiliser une approche dite statistique des résultats afin de pouvoir obtenir des informations statistiques sur les champs mécaniques.

La méthode que nous allons utiliser est la suivante : des simulations similaires à celles dont les résultats sont présentés dans les Figures 4.20 et 4.23 vont être réalisées pour un grand nombre de microstructures différentes. Ces simulations seront réalisées avec les mêmes paramètres, avec seulement des tesselations de Voronoi différentes d'une simulation à l'autre. Les résultats ne seront plus considérés un à un mais, mais utilisés pour déterminer des champs mécaniques moyens, ainsi que leur moments statistiques. De cette manière, nous pourrons quantifier un comportement moyen du polycristal par la simulation, tout en identifiant des comportements ou réponses « extrêmes ».

Nous avons besoin pour cette approche d'une mesure permettant de déterminer si le nombre de simulations que nous réaliser est suffisant. Pour cela, nous nous inspirons de la démarche de Kanit et al. [99]¹², qui cherchent dans leurs travaux à déterminer la taille du Volume Elémentaire Représentatif à choisir afin de correctement calculer des propriétés effectives. Une erreur absolue est alors définie telle que :

$$e_{\rm rel} = \left| \frac{2D_Z}{\overline{Z}\sqrt{N}} \right|,\tag{4.68}$$

où D_Z est l'écart-type des réalisations de la variable Z, \overline{Z} est la moyenne des réalisations de Z, et N est la nombre total de réalisations. Compte tenu du fait que les contraintes résiduelles calculées par la méthode présentée dans la Section 4.4 présentent de fortes variations au niveau des interfaces entre les grains pouvant perturber le calcul d'un champ moyen (voir Annexe C), le choix est fait de considérer les moments statistiques de la moyenne de la déformation plastique cumulée γ dans une zone au centre de l'impact ($-0.1 \leq y \leq 0.1$ et x = 0, voir Figure 4.28(a)), pour un certain nombre de réalisations. Suivant le nombre de simulations réalisées, nous obtenons la courbe présentée dans la Figure 4.26.

^{12.} La formule de Kanit et al. [99] est adaptée avec des valeurs absolues, certaines quantités pouvant être négatives (contraintes résiduelles, déformation plastique).



FIGURE 4.26 – Evolution de l'erreur relative sur la déformation plastique cumulée au centre de l'impact obtenue avec i simulations.

La Figure 4.26 représente donc l'évolution de l'erreur à partir de 5 simulations (en-dessous de ce seuil, nous considérons que trop peu de réalisations ont été effectuées pour pouvoir en tirer des conclusions pertinentes). L'erreur relative atteint donc un palier (1.4%) à partir de 19 réalisations. Le nombre maximal de réalisations effectuées, 30, est alors suffisant pour obtenir une description statistique complète du champ de la déformation plastique cumulée, avec une précision relative inférieure à 1.5 %.

4.6.2.2 Champ de déformation plastique dans un polycristal

Nous commençons par illustrer notre démarche en présentant dans la Figure 4.27 des cartographies de la déformation plastique cumulée moyenne, et de l'écart-type sur cette déformation, calculées sur 30 simulations. Le champ moyen présente une distribution homogène (i.e. sans influence visible des microstructures), et est symétrique. L'écart type est quant à lui particulièrement prononcé sur les bords de la tache laser.



FIGURE 4.27 – Moments statistiques du champ de déformation plastique cumulée obtenus sur 30 simulations. (a) Champ moyen. (b) Champ d'écart-type.

Nous présentons également des résultats de l'approche statistique relatifs à la déformation plastique cumulée globale γ (Figure 4.28) et la rotation de la maille cristalline ω (Figure 4.29) le long de lignes particulières : en surface (x = 0) et en profondeur au centre de l'impact (y = 0). Les différentes simulations réalisées pour aboutir à ces résultats permettent d'aboutir non seulement aux champs moyens, mais aussi au champs médians, et de déterminer des intervalles contenant les 10% des valeurs les moins et les plus élevées, afin d'obtenir plus d'informations sur la distributions des résultats.



FIGURE 4.28 – Champ moyen de la déformation plastique cumulée globale. (a) Valeurs du champ en surface (x = 0). (b) Valeurs du champ en profondeur et au centre de l'impact (y = 0).

La déformation plastique cumulée en surface (Figure 4.28(a)) présente un profil symétrique par rapport au centre de l'impact, avec des valeurs majoritairement centrées autour de la moyenne et de la médiane, en particulier à l'intérieur de l'impact. Les valeurs sont plus dispersées en profondeur (Figure 4.28(b)). En surface et au centre de l'impact, les fluctuations sont de l'ordre de 300 %. Comme vu précédemment, la rotation de la maille cristalline est aussi un marqueur de la plasticité, et est présentée en Figure 4.29.



FIGURE 4.29 – Champ moyen de la rotation de la maille cristalline en surface (x = 0).

Au contraire de la déformation plastique cumulée globale moyenne, la rotation de la maille cris-

talline moyenne est antisymétrique en surface par rapport au centre de l'impact, avec des valeurs très centrées autour de la moyenne et de la médiane. Les valeurs en profondeur selon une ligne au centre de l'impact ne sont pas représentées, mais sont quasi nulles. Les rotations de la maille cristalline sont donc induites préférentiellement sur les bords de la tache laser, là où l'état de contrainte est principalement en cisaillement. Ce résultat semble en accord, en terme de tendance seulement et au signe près, avec des mesures de microdiffraction des rayons-X effectuées par Chen et al. [46], illustrées sur la Figure 4.30. Les écarts entre nos simulations et ces résultats expérimentaux peuvent être liés à la taille de la tache laser et à la distribution spatiale de pression utilisées pour nos calculs. En effet, Chen et al. [46]¹³ utilisent un laser dont le diamètre de la tache laser est de 12 μ m. Pour cette taille de tache, il est possible que la distribution spatiale de pression que nous avons adopté, en particulier la zone plate au centre de la tache (voir Figure 4.8), ne soit pas valide. En effet, des auteurs effectuant des simulations pour cette taille de tache laser [188] utilisent une distribution de pression gaussienne, qui est susceptible d'introduire du cisaillement en surface sur toute la largeur de la tache, et non pas seulement sur les bords comme dans notre cas.



FIGURE 4.30 – Mesures par microdiffraction des rayons-X de la rotation de maille cristalline dans le plan de la surface impactée [46]. Des chocs successifs sont réalisés sur un ligne, et les différentes lignes indiquées sur la figure correspondent à des lignes de mesures perpendiculaires à la ligne selon laquelle les chocs ont été effectués, espacées de 20 μ m.

4.6.2.3 Champ de contraintes résiduelles dans un polycristal

Nous présentons maintenant les résultats pour les contraintes résiduelles.

^{13.} Nous notons cependant que dans leurs simulations [46], les auteurs utilisent une pression maximale de 7 MPa, pour un diamètre de tache laser et une intensité du laser identiques aux travaux de Vukelic et al. [188] (respectivement 12 μ m et 4 GW/cm²), alors que ces derniers utilisent une pression maximale d'environ 2700 MPa. De plus, des intensités similaires sont utilisées (pour une modélisation macroscopique) dans les travaux de Ayad et al. [15] par exemple, pour des pressions de l'ordre de quelques GPa.



FIGURE 4.31 – Champ moyen des contraintes résiduelles. (a) Valeurs du champ en surface (x = 0). (b) Valeurs du champ en profondeur et au centre de l'impact (y = 0).

Les résultats en surface pour les contraintes résiduelles (Figure 4.31(a)) contiennent des informations intéressantes. En effet, si les valeurs moyennes et médianes au centre de l'impact sont en compression, les valeurs atteignables par les contraintes à ce niveau peuvent aussi être en traction. Le profil en profondeur de la Figure 4.31(b) montre même que la répartition des contraintes résiduelles contient des valeurs proches de zéro sur toute l'épaisseur affectée par les contraintes résiduelles moyennes en compression. Cependant, nous retrouvons dans la Figure 4.31 les mêmes fortes variations que dans la Figure 4.23, dues aux joints de grains. Il est donc encore une fois intéressant de regarder le champ des contraintes résiduelles moyennées par grain, présenté en surface et profondeur sur la Figure 4.32.



FIGURE 4.32 – Champ moyen des contraintes résiduelles moyennées par grain. (a) Valeurs du champ en surface (x = 0). (b) Valeurs du champ en profondeur et au centre de l'impact (y = 0).

La Figure 4.32 fait apparaître les résultats de la Figure 4.31 de manière plus claire. En particulier, les contraintes résiduelles de la Figure 4.32(b) sont bien, en moyenne, en compression en profondeur au centre de l'impact. Cependant, la distribution des valeurs extrêmes atteint des valeurs positives. En théorie, de telles valeurs de contraintes résiduelles peuvent diminuer l'efficacité du traitement par grenaillage laser, si ces valeurs ne sont pas trop localisées à l'intérieur de l'impact. Dans l'optique où

cette situation se produit au niveau d'un échantillon ou d'une structure, il s'agirait d'endroits où une fissure ou un défaut pourrait préférentiellement s'initier, malgré le fait que les contraintes résiduelles soient globalement en compression dans le reste de la zone affectée.

Pour tous les résultats qui ont été montré jusqu'à présent, la taille moyenne des grains a été gardée fixe. Il s'agit cependant d'un paramètre influençant en premier lieu l'hétérogénéité du champ des déformations plastiques, et en conséquence le champ des contraintes résiduelles. Dans une dernière sous-section, nous allons donc étudier l'influence de la taille moyenne des grains sur les champs mécaniques.

4.6.3 Influence de la taille moyenne des grains

Le problème physique que nous considérons contient une donnée que nous ne modifions pas : le profil temporel du chargement en pression. Ainsi, pour un matériau donné, la longueur d'onde de l'onde de pression est fixe. Selon la taille moyenne de grain fixée, l'onde se propage donc simultanément à travers un nombre de grain donné, ce qui peut changer son comportement. En effet, il est raisonnable de s'attendre à ce que la propagation élasto-visco-plastique soit différente selon que l'onde se propage à travers un faible nombre de grains anisotropes (un ou deux), ou un grand nombre. L'objectif de cette sous-section est d'apporter des éléments de quantification sur l'influence de la taille de grain sur la propagation de l'onde de contrainte. Cette influence sera observée sur la déformation plastique cumulée, et sur les profils de vitesse en face arrière, dont il n'a encore pas été question dans ce chapitre.

4.6.3.1 Influence de la taille moyenne des grains sur le champ de la déformation plastique cumulée

Afin d'étudier l'influence de la taille moyenne des grains sur le champ de la déformation plastique cumulée, nous suivons la même méthodologie qu'à la Section 4.6.2, mais pour différentes tailles moyennes de grains. A l'aide de ces séries de simulations, nous pourrons tracer l'évolution de l'erreur relative introduite par l'Equation (4.68), déjà utilisée dans la Figure 4.26. Des microstructures types de chaque taille moyenne de grains sont illustrées sur la Figure 4.33.



FIGURE 4.33 – Microstructures types utilisées pour le calcul des champs de déformation plastique cumulée. (a) Taille moyenne de grain de 40 μ m. (b) Taille moyenne de grain de 80 μ m. (c) Taille moyenne de grain de 160 μ m.

Pour chacune des microstructures de la Figure 4.33, 30 simulations sont effectuées, en utilisant les mêmes paramètres que pour la sous-section 4.6.1. Nous commençons par étudier l'influence de la taille de la microstructure sur la moyenne des champs des déformations plastiques cumulées, dont les distributions en surface et en profondeur sont présentées dans la Figure 4.34.
4.6. DÉFORMATIONS PLASTIQUES ET CONTRAINTES RÉSIDUELLES INDUITES PAR CHOC LASER DANS UN POLYCRISTAL



FIGURE 4.34 – Distributions de la moyenne des déformations plastiques cumulées moyennées sur 30 simulations. (a) Valeurs en surface (x = 0). (b) Valeurs en profondeur (y = 0).

Il est alors intéressant de remarquer que pour les 30 simulations réalisées, la taille moyenne des grains de la microstructure n'a qu'une influence limitée sur le champ moyen des déformations plastiques cumulées. Pour commencer à illustrer l'influence de la taille moyenne des grains d'une microstructure, il peut être intéressant de comparer les profils de la déformation plastique cumulée moyenne avec ceux de réalisations particulières, choisies pour les différents types de microstructures. Pour le comportement moyen, seul celui obtenu avec la microstructure contenant des grains de taille moyenne $d_{grain} = 160 \ \mu$ m est utilisée, car il a été montré que les moyennes obtenues avec les autres tailles moyennes de grains sont identiques (Figure 4.34).

0.06 0.10 $d_{grain} = 40 \; \mu \mathrm{m}$ $d_{grain} = 40 \ \mu m$ mean $d_{arain} = 160 \ \mu m$ 0.05 - mean $d_{grain} = 160 \ \mu m$ 0.08 0.04 0.06 ~ 0.03 0.04 0.02 0.02 0.01 0.00 | 0.00 0.00 0.25 0.50 0.75 1.25 -1.01.0 1.00 1.50 -0.5 0.0 0.5 1.5 $u \,(\mathrm{mm})$ x (mm)(a) (b) 0.06 0.10 $d_{grain} = 80 \ \mu m$ mean $d_{arain} = 160 \ \mu m$ $d_{arain} = 80 \ \mu m$ 0.05 mean $d_{arain} = 160 \ \mu m$ 0.08 0.04 0.06 0.03 0.04 0.02 0.02 0.01 0.00 0.00 -1.0 -<u>0</u>.5 0.0 1.0 0.25 0.50 0.75 1.25 1.50 0.5 1.5 1.00 y (mm) x (mm) (c) (d) 0.06 0.10 $d_{grain} = 160 \; \mu \mathrm{m}$ $d_{grain}\,{=}\,160\;\mu\mathrm{m}$ mean $d_{grain}\,{=}\,160~\mu{\rm m}$ -0-0.05 mean $d_{grain} = 160 \ \mu m$ 0.08 0.04

4.6. DÉFORMATIONS PLASTIQUES ET CONTRAINTES RÉSIDUELLES INDUITES PAR CHOC LASER DANS UN POLYCRISTAL

FIGURE 4.35 – Comparaison des profils de déformation plastique cumulée, en surface et en profondeur, entre une réalisation d'un type de microstructure, et le champ moyen calculé sur 30 réalisations. (a) Profil en surface, $d_{grain} = 40 \ \mu\text{m}$. (b) Profil en profondeur, $d_{grain} = 40 \ \mu\text{m}$. (c) Profil en surface, $d_{grain} = 80 \ \mu\text{m}$. (d) Profil en profondeur, $d_{grain} = 80 \ \mu\text{m}$. (e) Profil en surface, $d_{grain} = 160 \ \mu\text{m}$. (f) Profil en profondeur, $d_{qrain} = 160 \ \mu\text{m}$.

∼ 0.03

0.02

0.01

0.00

0.25

0.50

0.75

x (mm)

(f)

1.00

1.25

1.50

Les résultats de la Figure 4.35 montrent qu'une influence directe de la taille moyenne de grain de la microstructure est la densité d'interfaces, sur lesquelles des concentrations de déformation plastique sont observées. Les simulations avec le plus d'interfaces présentent donc des profils de déformation

0.06

0.04

0.02

0.00 <u>-</u>1.5

-1.0

-0.5

0.0

y (mm) (e) 0.5

1.0

1.5

4.6. DÉFORMATIONS PLASTIQUES ET CONTRAINTES RÉSIDUELLES INDUITES PAR CHOC LASER DANS UN POLYCRISTAL

plastique cumulée avec plus de fortes variations (Figures 4.35(a) et 4.35(b)). Ces conclusions ne sont à ce niveau valables que pour les réalisations choisies dans la Figure 4.35. L'influence de la taille moyenne des grains peut également être étudiée via l'évolution de l'erreur relative entre les microstructures (pour la même mesure choisie à la Figure 4.26). L'évolution des erreurs relatives en fonction du nombre de simulations effectuées pour les différentes tailles de grains est présentée dans la Figure 4.36.



FIGURE 4.36 – Evolution de l'erreur relative sur la moyenne de la déformation plastique cumulée au centre de l'impact obtenue avec *i* simulations.

Selon les résultats de la Figure 4.36, il apparaît que pour un nombre de simulations donné, l'erreur relative sur la déformation plastique cumulée moyenne en surface au centre de l'impact est minimale en considérant une taille de grains de 40 μ m. Au bout de 30 réalisations, la moyenne de la déformation plastique cumulée moyenne en surface au centre de l'impact est quasi identique pour les trois tailles de microstructure considérées (~ 0.03). L'écart entre les erreurs traduit donc une plus faible dispersion des résultats pour la taille $d_{grain} = 40 \ \mu$ m. Ces résultats ne sont valables a priori que pour la mesure de l'erreur choisie. Ces résultats apportent une certaine contradiction avec l'intuition donnée par la Figure 4.35, qui poussait à penser que de gros grains, donnant des microstructures avec une plus faible densité d'interfaces, conduisaient à des résultats moins dispersés. Ainsi, si les champs moyens ne dépendent pas de la taille moyenne des grains de la microstructure, il est plus difficile de conclure sur l'influence de la taille de la microstructure sur la dispersion des champ mécaniques.

L'analyse qui vient d'être faite se prête bien à l'étude de l'influence de la taille de microstructure sur la propagation de l'onde de contrainte en elle-même, au travers de l'étude de la vitesse en face arrière d'un échantillon fin impacté sur sa face avant (mesurable expérimentalement).

4.6.3.2 Influence de la taille moyenne des grains sur la vitesse en face arrière

Paramètres des simulations Il est nécessaire ici de modifier légèrement les paramètres des simulations. En effet, l'étude de la vitesse en face arrière nécessite un échantillon mince, afin que l'onde de contrainte ne soit pas trop atténuée lorsqu'elle arrive à la face arrière, pour que le résultat contienne des informations sur le comportement élasto-visco-plastique. Nous changeons donc les dimensions du modèle, et utilisons $L_x = 0.5$ mm et $L_y = 3$ mm. Seule l'épaisseur de l'échantillon a été réduite. Tous les autres paramètres restent identiques aux simulations précédentes. Nous considérons toujours les trois mêmes tailles de microstructure présentées dans la Figure 4.33. Des microstructures types utilisées pour les simulations de vitesse en face arrière sont présentées dans la Figure 4.37.



FIGURE 4.37 – Microstructures types utilisées pour le calcul des vitesses en face arrière. (a) Taille moyenne de grain de 40 μ m. (b) Taille moyenne de grain de 80 μ m. (c) Taille moyenne de grain de 160 μ m.

Résultats des simulations De nouveau, 30 simulations sont effectuées pour chacune des tailles de microstructure présentées dans la Figure 4.37. De manière similaire à la Figure 4.34, nous commençons par présenter les profils de vitesses en face arrière moyenne pour les différentes tailles moyennes de grains dans la Figure 4.38, ainsi que trois profils uniques, un pour chaque type de microstructure.



FIGURE 4.38 – Profils de vitesses en face arrière moyennes pour les différents types de microstructures. (a) Une réalisation unique pour chaque taille moyenne de grain différente. (b) Profils moyens réalisés sur 30 simulations pour les trois types de microstructures.

Les profils de vitesse en face arrière de la Figure 4.38 présentent chacun deux pics. Chaque pic correspond à l'onde de contrainte (ou de vitesse, de manière équivalente) arrivant au niveau de la face arrière. Le temps écoulé entre les deux pics correspond au temps nécessaire à l'onde pour faire un allerretour depuis la face arrière. Les profils font également apparaître clairement le précurseur élastique au niveau du premier pic, ce dernier étant d'une valeur environ égale à 19 m.s⁻¹. La Figure 4.38(a)

4.6. DÉFORMATIONS PLASTIQUES ET CONTRAINTES RÉSIDUELLES INDUITES PAR CHOC LASER DANS UN POLYCRISTAL

montre un profil de vitesse en face arrière pour une réalisation de chaque type de microstructure. Des écarts sont visibles entre ces profils, mais sont faibles. Le précurseur semble peu affecté par la taille moyenne de la microstructure. Dans la Figure 4.38(b), l'influence de la taille moyenne des grains est indiscernable lorsque nous ne considérons que la moyenne de la vitesse en face arrière. Dans la Figure 4.39, nous présentons la répartition statistique des profils de vitesse en face arrière.



FIGURE 4.39 – Profils de vitesse en face arrière moyenne. (a) Pour une taille moyenne de grain de 40 μ m. (b) Pour une taille moyenne de grain de 80 μ m. (c) Pour une taille moyenne de grain de 160 μ m. (d) Zoom au niveau du précurseur pour la taille moyenne de grain de 160 μ m.

Comme pour les résultats de la sous-section 4.6.2, la Figure 4.39 présente la vitesse en face arrière moyenne, médiane, et un faisceau de valeurs contenant les valeurs prises par la vitesse en face arrière pour toutes les simulations. Il est immédiatement remarquable que les valeurs de vitesse en face arrière semblent très centrées autour d'un comportement moyen. Cela peut être expliqué par le fait que le contraste de propriétés mécaniques dans la direction de propagation reste faible pour l'application considérée (voir Figure 4.3). Un épaississement du faisceau de valeur peut néanmoins être remarqué. Encore une fois, plus la taille moyenne des grains est grande, plus les résultats sont dispersés entre deux microstructures statistiquement équivalente. Le premier pic des vitesses est peu affecté par la taille de la microstructure hormis au niveau du précurseur élastique (~ 19 MPa, 80 ns), où la dispersion des valeurs augmente avec la taille moyenne des grains de la microstructure. La vitesse minimale introduisant une déformation plastique peut donc varier d'une microstructure à l'autre, en particulier

pour une microstructure avec de gros grains (voir Figure 4.39(c)). Par ailleurs, l'inflexion du profil de vitesse en face arrière (moyenne ou médiane) au niveau des précurseurs élastiques est faible pour les tracés de la Figure 4.39, et traduit donc une transition continue de l'élasticité à la plasticité (contrairement à un modèle parfaitement plastique par exemple, voir Chapitre 3). Cela peut s'interpréter en partie par le fait que les grains, de par leurs orientations différentes, ne plastifient pas pour la même valeur de contrainte. Lorsque l'onde passe par plusieurs grains successifs, ces différentes valeurs de vitesses conduisant à la plasticité étalent le précurseur, et lui donnent sa nature continue observée ici. D'autre part, un modèle de plasticité dépendant de la vitesse de déformation peut causer des précurseurs continus (voir Chapitre 2), contrairement à des modèles de plasticité qui en sont indépendants. En effet, la vitesse de propagation suit la même monotonie que le module tangent. Une diminution continue de module tangent résulte donc en une diminution continue de la vitesse de propagation (et inversement). D'où les précurseurs étalés sur la Figure 4.39. Pour compléter cette analyse, nous pouvons nous intéresser à l'évolution de l'erreur relative sur le maximum des profils de vitesse en face arrière en fonction du nombre de simulations. Ces résultats sont présentés dans la Figure 4.40.



FIGURE 4.40 – Evolution de l'erreur relative sur la vitesse maximale en face arrière obtenue avec i simulations.

L'interprétation de la Figure 4.40 est similaire à celle de la Figure 4.36 : plus la taille moyenne des grains est grande, plus l'erreur est importante pour un nombre de simulations donné. Cependant, quelque soit le nombre de simulations, les erreurs relatives pour les microstructures contenant des grains de tailles moyennes 80 μ m et 160 μ m sont proches, ce qui semble indiquer une influence modérée de la taille de la microstructure pour des gros grains. Comme indiqué par la Figure 4.38(b), la moyenne des profils de vitesse en face arrière est peu sensible à la taille de la microstructure. Des différences entre les erreurs proviennent donc de différences entre les écart-types. Cela signifie que les résultats de vitesse en face arrière présentent une plus grande dispersion pour des grandes tailles de grains.

Cette section a donc montré que peu importe la taille de la microstructure, le comportement moyenné sur les simulations effectuées tend vers la même moyenne. Une perspective de ce travail serait de déterminer si ce comportement moyen correspond à un modèle macroscopique, et si oui lequel. Les calculs menés afin de déterminer l'influence de la taille moyenne des grains de la microstructure n'ont cependant pas permis de faire apparaître une tendance nette. En conséquence, une conclusion définitive sur l'influence de la taille moyenne des grains sur la dispersion des champs mécanique reste à être établie.

4.7 Conclusion

Ce chapitre s'est intéressé à l'influence de la prise en compte d'une microstructure polycrystalline sur la propagation d'une onde de contrainte et des champs de déformations plastiques et de contraintes résiduelles induits. Pour cela, un formalisme simplifié a été utilisé. La propagation a été considérée en déformations planes. Au lieu de considérer l'ensemble des systèmes de glissements d'un type de maille donnée, deux systèmes de glissements arbitraires ont été utilisés, de sorte à limiter le temps d'exécution des calculs, et à conserver un état de déformation plastique plan. La propagation de l'onde de contrainte élastique a été modélisée par un système d'EDP hyperbolique, résolu à l'aide d'un schéma numérique explicite de type Godunov. A cette résolution est ajouté un modèle de plasticité cristalline visco-plastique. Des premières simulations sur des monocristaux permettent d'observer des bandes de localisation de la déformation plastique, orientées selon les directions des systèmes de glissement. Sans même considérer de microstructure, les contraintes résiduelles sont dépendantes de l'orientation du cristal choisie, les rendant plus ou moins en compression. L'incorporation d'une microstructure de type tesselation de Voronoi influence grandement la distribution des déformations plastiques et des contraintes résiduelles, qui portent la marque de la microstructure. Cependant, dans le cas des contraintes résiduelles, de fortes concentrations sont observées aux joints de grains, qui ne dépendent ni du maillage, ni de l'hétérogénéité des propriétés mécaniques. L'origine de ce phénomène doit encore être confirmée, une piste étant la forme des joints de grains en escalier dus au maillage régulier imposé la méthode des différences finies (voir Anglin et al. [9] et l'Annexe C). L'influence moyenne de la microstructure est ensuite étudiée, en réalisant une approche statistique du problème. Ce chapitre a également montré à l'aide d'un grand nombre de simulations que les champs mécaniques (résiduels ou relatifs à la propagation de l'onde de contrainte) tendent vers la même moyenne peu importe la taille moyenne des grains donnée pour les microstructures. Cette caractéristique rejoint celle des modèles macroscopiques classiquement utilisés pour le choc laser (comme le modèle de Johnson-Cook), qui ne présentent pas de dépendance à la taille de grains. Cependant, nous avons montré que la microstructure induit une dispersion des champs mécaniques, dont la caractérisation est absente des modèles macroscopiques. Cette dispersion est importante, car elle peut donner des informations sur le cas le plus défavorable à la tenue en fatigue par exemple. Notamment, les contraintes résiduelles induites par le choc laser simulées dans les microstructures peuvent être plus ou moins en compression au centre de l'impact. Nous avons également tenté de faire le lien entre la taille moyenne des grains de la microstructure et la dispersion des champs mécaniques, sans pouvoir cependant atteindre une conclusion définitive. Loin d'être complets, les travaux présentés dans ce chapitre ouvrent les perspectives suivantes :

1. La modélisation mécanique et le comportement visco-plastique du matériau peuvent être enrichis par une description totale en 3 dimensions. La microstructure polycristalline que nous souhaitons représenter ne présentant pas de symétries apparentes, seul un modèle 3D est capable de la modéliser correctement. Une telle modélisation permettrait également de considérer tous les systèmes de glissement du type de maille considérée, puisqu'il n'y aurait plus lieu de s'assurer que le tenseur des déformations plastiques soit plan. De la même manière qu'il a été montré que l'orientation des systèmes de glissement avait une influence directe sur la distribution des champs mécaniques, nous pouvons raisonnablement nous attendre à des distributions différentes si tous les systèmes de glissement sont considérés.

- 2. Nous avons montré à l'aide d'un grand nombre de simulations qu'il est possible de faire apparaître un comportement moyen de la microstructure. Il serait particulièrement intéressant de montrer qu'il est possible de déterminer un modèle macroscopique équivalent (soit homogénéisé, soit identifié à partir d'une loi macroscopique) permettant de calculer directement le comportement moyen de la microstructure et les fluctuations statistiques des champs mécaniques, à condition que la taille moyenne des grains de cette dernière soit assez faible. Cette approche aurait le premier avantage d'être beaucoup plus économe en temps de calcul. En effet les calculs en champs complet nécessitent un maillage d'autant plus fin que les grains sont petits afin de faire converger les calculs. Si cela est déjà suffisant pour alourdir les calculs, le respect de la condition CFL pour les calculs en dynamique explicite vient allonger encore les temps de calculs. Par ailleurs, si un tel modèle équivalent existe, il serait intéressant de regarder comment ce dernier se compare à des modèles macroscopiques déjà utilisés pour le choc laser.
- 3. Le lien entre les caractéristiques de la microstructure et la dispersion des champs mécaniques, notamment pour les contraintes résiduelles, serait un complément important à cette étude. Cela permettrait, pour une microstructure donnée, d'aider à quantifier l'écart que l'on peut attendre entre deux mesures réalisées entre deux échantillons traités par grenaillage laser de manière équivalente. De plus, une telle information permettrait de quantifier le niveau de contraintes résiduelles que l'on peut réellement attendre dans une structure ou un échantillon, à partir d'une simulation macroscopique donnant accès à un comportement moyen, et donc d'optimiser les étapes de dimensionnement, en prenant en compte le cas le plus conservatif.
- 4. Enfin, il manque à cette étude une comparaison expérimentale. Il est envisageable de comparer dans un premier temps les rotations de la maille cristalline induite par l'impact laser avec des mesures par EBSD. De telles mesures pourraient être réalisées soit en surface si possible, soit en profondeur selon une ligne proche des bords de la tache laser, là où le cisaillement est maximal. A l'heure actuelle, ces travaux doivent être repris par un travail postdoctoral (début octobre 2022, ANR ForgeLaser). Bien que les contraintes résiduelles soient une grandeur d'intérêt du problème, il semble difficile de pouvoir atteindre une résolution spatiale suffisante pour pouvoir vérifier les observations numériques faites dans ce chapitre, en particulier leur comportement au niveau du joint de grain. Des mesures obtenues en synchrotron peuvent potentiellement aider à étudier ces aspects.

Conclusion générale et perspectives

Conclusion générale

Le travail présenté dans cette thèse avait pour but d'étudier l'influence des hétérogénéités microstructurales sur les contraintes résiduelles induites par le procédé du grenaillage laser. Pour mener à bien ce travail, nous avons dû nous intéresser également à la propagation de l'onde de contrainte provoquée par l'impact laser dans le matériau élasto-(visco)-plastique hétérogène. Cette problématique concerne la thématique d'augmentation des durées de vie de pièces ou de structures pour diverses applications (aéronautique, énergie), en particulier la résistance à la fatigue. Cette thèse a donc tenté d'apporter des éléments de réponse sur la connaissance et la maîtrise des champs mécaniques résiduels à une échelle plus fine que celle habituellement utilisée dans les travaux concernant le choc laser. Ces éléments de réponse peuvent concerner aussi bien le grenaillage laser standard (taches laser millimétriques) où la réponse du matériau n'est connue qu'à l'échelle macroscopique, que pour le procédé du dit micro-LSP (taches laser micrométriques), où une connaissance du comportement de la microstructure est essentielle. Le travail effectué dans cette thèse est de nature numérique seulement, et incorpore des aspects de modélisation et simulation.

Le Chapitre 1 avait pour objectifs de présenter le contexte de l'étude ainsi que ses axes de développement. Le procédé du grenaillage laser y a été présenté, dans un premier temps de manière expérimentale, afin de mettre en avant les techniques nécessaires à son implémentation, mais aussi ses avantages par rapport à d'autres procédés de traitement de surface similaires. Dans le but de faire un état de l'art des simulations de grenaillage laser, différents aspects de ces simulations ont été présentés : lois de comportement (macroscopiques et mésoscopiques) et méthodes numériques. Nous avons pu montrer que les simulations de grenaillage laser ont beaucoup progressé depuis les premiers travaux de Ballard [18] et Braisted [28] et ont aujourd'hui atteint certaines limites (extrapolation du comportement du matériau pour les vitesses de déformations extrêmes typiques du choc laser, limites de la résolution spatiale des analyses expérimentales des contraintes résiduelles). Nous avons également montré que certains travaux de la littérature [183, 188, 189] s'intéressent à la problématique du choc laser à l'échelle des grains dont sont constituées les microstructures des cibles utilisées. Ces travaux concernant soit des mono ou bicristaux, ou des microstructures avec des modèles de comportement inadaptés, notre étude s'est donc située à la jonction de ces deux aspects.

Le Chapitre 2 nous a servi à présenter les bases de la modélisation et des simulations utilisées dans le reste du manuscrit. En s'appuyant sur des travaux de la littérature [85, 119], nous utilisons un système d'EDP hyperbolique afin de modéliser l'équation de propagation de l'onde de contrainte, ici dans un matériau homogène élasto-plastique. Cette approche présente certains avantages par rapport à un formalisme EF : les inconnues du problème étant directement les composantes du tenseur des contraintes et du vecteur vitesse, les conditions aux limites en chargement et de non réflexivité s'écrivent de manière naturelle. De plus, la résolution de ce type d'équation peut se faire via un large éventail de méthodes numériques, certaines évitant intrinsèquement des erreurs numériques classiques de la résolution de problèmes en dynamique explicite telles que des oscillations ou de la viscosité numérique. La propagation de l'onde de contrainte étant résolue pour un matériau élastique, nous montrons également dans ce chapitre que la plasticité peut être prise en compte par une étape de retour radial [26]. Ces aspects sont mis en pratique dans ce chapitre sur un cas unidimensionnel, dont nous montrons cependant la pertinence face à un modèle 3D axisymétrique EF, que cela soit pour la propagation de l'onde de contrainte ou les champs résiduels induits. L'outil numérique développé permet donc de faire une première estimation rapide de ces contraintes résiduelles, et pourra à l'avenir être utilisé efficacement pour identifier la loi de comportement macroscopique du matériau à partir de mesures de vitesse en face arrière. Les résultats des simulations présentées dans ce chapitre ont également été confrontés à des solutions analytiques, ce qui a permis de valider notre approche, ainsi que juger de la qualité des différentes méthodes numériques utilisables pour ce problème.

Dans le Chapitre 3, nous avons introduit la notion d'hétérogénéité des propriétés mécaniques. La méthode de modélisation du Chapitre 2 est ici reprise et appliquée au cas d'un matériau laminé à deux phases formant un motif périodique. Ce motif d'hétérogénéité, bien que simple, permet déjà d'observer l'influence de variations des propriétés mécaniques sur la propagation de l'onde de contrainte élasto-plastique (étendant ainsi les résultats en élasticité de [20, 40]). Plusieurs tests numériques sont effectués, en considérant différentes hétérogénéités de propriétés élastiques, mais aussi de limite élastique. Cette influence est d'abord présentée sur la propagation de l'onde de contrainte, avec comme aspect remarquable la présence de deux précurseurs, chacun correspondant à la contrainte (ou vitesse, de manière équivalente) nécessaire pour faire plastifier la phase en question. Le profil des déformations plastiques présente également une forte dépendance à la microstructure, sous la forme de discontinuités correspondant aux interfaces entre les phases. Afin de décrire plus en détail l'influence de la microstructure hétérogène, un modèle homogénéisé élasto-plastique est développé (selon une approche statique), en se basant sur des résultats exacts pour la structure laminée [83, 127]. Nous avons montré que pour tous les tests numériques considérés, ce modèle homogénéisé est capable non seulement de décrire correctement le comportement moyen de l'onde se propageant au travers du laminé, mais également le comportement local des phases. En plus de rendre possible des calculs pour un coût numérique moindre, ce modèle homogénéisé permet de conclure que la microstructure induit un comportement effectif dont la forme est différente des modèles de comportement locaux de chacun des phases. Nous avons montré enfin que cette approche n'est valide qu'à condition que la taille caractéristique des couches du laminé soit petite devant la longueur d'onde de l'onde de contrainte.

Enfin, le Chapitre 4 a repris les méthodologies des chapitres précédents dans le cas d'une microstructure polycristalline, dans le cadre toutefois simplifié d'une modélisation 2D en déformation plane et de grains au comportement fictif comportant deux systèmes de glissement seulement. La géométrie de la microstructure est représentée par une tesselation de Voronoi, introduisant un aspect aléatoire dans les simulations. Le comportement des grains est supposé anisotrope cubique, et suivant une loi de plasticité cristalline visco-plastique. Des calculs de choc laser sur des monocristaux ont montré que les contraintes résiduelles présentent une dépendance à l'orientation de la maille cristalline par rapport à la direction du choc, les amenant à être plus ou moins en compression au niveau de l'impact, en accord avec Breumier et al. [32]. Notamment, des bandes de localisation de la déformation plastique partent des bords de l'impact dans la direction des plans de glissement. Puis, nous avons montré qu'à l'image des résultats du Chapitre 3, l'introduction de la microstructure polycristalline influence grandement les champs mécaniques résiduels, ce derniers présentant des gradients dont la forme suit celle de la microstructure. Nous observons également des bandes de localisation de la déformation plastique de répartition radiale. Afin de pouvoir tirer des conclusions indépendantes de la réalisation aléatoire de la microstructure, nous avons présenté une approche statistique du problème. Dans cette dernière, plusieurs simulations pour des microstructures se différenciant par leurs distributions et orientations de grains sont utilisées pour tracer la répartition statistique de champs mécaniques. Ces répartitions montrent notamment que si les contraintes résiduelles sont bien en moyenne en compression au centre de l'impact, les valeurs sont dispersées et peuvent même être localement en traction. Ce résultat semble indiquer que bien que des mesures de contraintes résiduelles indiquent des résultats en compression. il serait possible d'avoir, très localement, des zones où l'avantage conféré par LSP serait absent, qui seraient alors des zones privilégiées pour l'initiation de fissures. La taille des grains a une influence sur la dispersion des champs mécaniques, mais son étude doit encore être approfondie.

Perspectives

Le travail effectué durant cette thèse a permis de mettre en lumière les perspectives suivantes concernant le grenaillage laser.

Concernant maintenant le travail de ce manuscrit, les développements présentés ouvrent les perspectives suivantes :

- 1. La méthode de calcul rapide des champs mécaniques induits par le choc laser développée dans le Chapitre 2 pourrait être incorporée dans une méthode d'identification rapide des paramètres du modèle de Johnson-Cook basée sur des mesures expérimentales. Compte-tenu de la nature très paramétrable de l'outil numérique, une approche par Machine-Learning pourrait être étudiée pour résoudre efficacement ce problème inverse. Le code développé pourrait également être enrichi afin de prendre en compte des aspects thermiques du problème, pour une configuration sans revêtement protecteur sur l'échantillon. Les effets thermiques produisent un adoucissment des contraintes résiduelles, pouvant en introduire en traction à la surface [77, 165].
- 2. Dans le Chapitre 3, l'homogénéisation réalisée n'a concerné que le comportement statique. Certains auteurs ont montré la possibilité de réaliser une homogénéisation dynamique de l'équation d'onde, mais en élasticité seulement [20, 40, 131, 192]. Une extension de ces développements aux comportements visco-plastiques serait intéressante, et à comparer avec nos développements basés sur une homogénéisation statique.
- 3. Le Chapitre 4 ouvre également de nombreuses perspectives. (i) Une perspective immédiate est de procéder à une modélisation plus complète de la description du matériau, en utilisant une modélisation 3D, et l'ensemble des systèmes de glissement du type de maille considérée. Les calculs présentés dans ce manuscrit ont été réalisés à l'aide d'algorithmes Python développés pour la thèse. Cet outil permet une liberté d'action sur tous les aspects du calcul, mais est limité en puissance de calcul. Pour des calculs plus lourds, il serait alors judicieux de se reposer sur des logiciels de calcul EF déjà existants. (ii) La méthodologie développée dans le Chapitre 3 n'a

pas pu être appliquée entièrement au cas de la microstructure polycristalline, un comportement homogénéisé n'ayant pas été utilisé. D'une part, une loi visco-plastique macroscopique avec des paramètres adaptés à la microstructure choisie peut être considérée. D'autre part, le modèle auto-cohérent semble adapté pour procéder à l'homogénéisation d'une microstructure polycristalline [30], mais la nature visco-plastique du comportement local complexifie la détermination d'un milieu équivalent homogène. (iii) Il est également possible de revoir la modélisation de la microstructure et de prendre en compte d'autres paramètres microstructuraux (allongement des grains, texture cristallographique, etc.) qui procurent une anisotropie au comportement macroscopique. (iv) Enfin, le modèle de plasticité cristalline permet le calcul des rotations de la maille cristalline. Ces dernières étant mesurables expérimentalement, une comparaison entre les résultats expérimentaux et numériques est à envisager. Cette comparaison pourrait être un moyen d'identifier des paramètres de loi de plasticité cristalline adaptés au choc laser (dans le cas d'un monocristal par exemple), de vérifier la pertinence des simulations de choc laser sur un agrégat cristalline, et éventuellement d'étudier l'influence de la taille de grain sur le champ des rotations cristallines induit par le choc laser.

De manière générale, sur le grenaillage laser, les perspectives sont les suivantes :

- 1. Les simulations de grenaillage laser publiées dans la littérature font maintenant presque exclusivement toutes appel au modèle de Johnson-Cook pour décrire la dépendance à la vitesse de déformation du comportement du matériau. Même si ce modèle à de nombreux avantages et permet des simulations satisfaisantes, il convient de garder en tête qu'il s'agit d'un modèle phénoménologique, dont la forme n'a pas été développée pour les ordres de grandeur de vitesse de déformation du choc laser (10⁶ s⁻¹). Une confirmation ou une infirmation de la pertinence de la forme de l'écrouissage du modèle de Johnson-Cook doit encore être démontrée expérimentalement. De plus, lors de simulations de plusieurs impacts laser (avec ou sans recouvrement), les travaux de la littérature ne considèrent pas d'écrouissage cinématique, pourtant importants lors de sollicitations cycliques [35, 148]
- 2. La vérification de la pertinence des simulations de contraintes résiduelles est souvent limitée par la résolution spatiale des méthodes expérimentales. En effet, les simulations permettent d'avoir accès à des valeurs locales de contrainte, là où les mesures expérimentales sont des moyennes sur un volume donné. Il existe cependant des pistes pour contourner ce problème. Morin et al. [133] proposent une méthode basée sur l'analyse des contraintes résiduelles par rayons X qui permettrait, à l'aide de deux mesures moyennant les contraintes sur des surfaces différentes, de reconstruire avec plus de précision les contraintes résiduelles en surface d'un échantillon. Cette méthode, testée avec succès sur des expériences numériques, n'a pas encore été mis en application expérimentalement. L'application de certaines méthodes de contrôle non-destructif [55, 62] pourraient également être envisagée pour l'étude des contraintes résiduelles.
- 3. Si le lien entre contraintes résiduelles de compression et amélioration du comportement en fatigue est avéré, y compris dans le cas du choc laser, peu d'études numériques vont jusqu'au comportement en fatigue. Les travaux de la littérature s'appuient généralement sur des simulations pour analyser les champs mécaniques résiduels, qu'ils utilisent ensuite pour interpréter les résultats des tests de fatigue (par exemple : influence de l'épaisseur de l'échantillon [79], influence du motif de recouvrement [3, 23, 53, 113]). Les comparaisons expériences-simulations concernent pour l'instant la propagation de fissure [100, 160]. Une méthode permettant de faire le lien entre les paramètres du choc laser et la durée de vie estimée serait un outil puissant.

Annexe A

Étude des méthodes analytiques et numériques pour la propagation d'onde de contrainte

Contenu

A.1	Propa	gation d'une onde de contrainte élastique dans un matériau homogène 166	
	A.1.1	Paramètres du modèle	
	A.1.2	Solution numérique	
A.2	Propa	gation d'une onde de contrainte élastique dans un matériau hétérogène 168	
	A.2.1	Paramètres du modèle	
	A.2.2	Solution analytique	
	A.2.3	Solution numérique	
A.3	3 Propagation d'une onde de contrainte élasto-plastique dans un matériau homogène 172		
	A.3.1	Paramètres du modèle	
	A.3.2	Cas d'une amplitude de pression σ_0 telle que $\sigma_0 \leq 2\sigma_{\text{HEL}}$	
	A.3.3	Cas d'une amplitude de pression σ_0 telle que $\sigma_0 > 2\sigma_{\text{HEL}}$	
	A.3.4	Comparaison des méthodes de calcul de la plasticité	
A.4	Conclu	usion	

Cette annexe vise à présenter des comparaisons entre résultats analytiques et résultats numériques obtenus pour plusieurs méthodes de résolution de l'équation d'advection (2.13). La solution analytique de la propagation peut être obtenue par méthodes de caractéristiques comme démontré par Ballard [18]. Cette annexe contient une démonstration détaillée de la solution analytique, dans différents cas utiles pour le corps du manuscrit : un matériau élastique homogène, un matériau élastique hétérogène et un matériau élasto-plastique homogène. Le cas du matériau élastique homogène permet d'étudier l'influence de la condition CFL sur les méthodes numériques utilisées. Le cas d'un matériau hétérogène élastique permet d'étudier la précision des méthodes numériques lors de la présence d'une interface entre deux matériaux d'impédances différentes. Enfin, le cas du matériau homogène élastoplastique permet d'étudier la précision des méthodes numériques lorsque que la propagation de l'onde de contrainte engendre une déformation plastique du matériau. Les méthodes numériques testées sont celles présentées dans la Section 1.8 : Lax-Friedrichs, Lax-Wendroff, Godunov et Godunov à Haute Résolution. De plus, la solution donnée par le code commercial ABAQUS¹ (obtenue pour des conditions de modélisation équivalentes) sera analysée, pour différents paramètres de viscosité artificielle.

A.1 Propagation d'une onde de contrainte élastique dans un matériau homogène

Le cas d'un matériau élastique homogène permet de tester la sensibilité des méthodes numériques considérées à la condition CFL (1.46). Cette condition fixe la relation entre les incréments spatiaux et temporels de la simulation, respectivement Δx et Δt , et la vitesse de propagation élastique de l'onde $c_e : c_e \Delta t / \Delta x = CFL$, avec CFL le nombre CFL, compris entre 0 et 1 pour que la méthode numérique explicite soit stable. Cette condition assure la stabilité du schéma numérique durant la résolution.

A.1.1 Paramètres du modèle

Paramètres matériau et géométriques La modélisation reprend les hypothèses de la Section 2.2, en particulier l'hypothèse d'un champ de déformations totales uniaxial. Le modèle matériau utilisé ici correspond à un échantillon purement élastique, dont le comportement est décrit par son module de Young E et son coefficient de Poisson ν . Pour l'application numérique, le matériau est proche d'un acier, avec E = 210 GPa, et $\nu = 0.3$. La longueur de l'échantillon L est fixée à L = 5 mm.

Chargement et condition aux limites L'objectif de cette partie étant de tester la capacité des méthodes numériques à modéliser correctement la propagation d'un signal de pression en entrée, un profil de chargement particulier sera utilisé, combinant des variations de pression discontinues et continues. Le chargement consiste donc en une demi-sinusoïde de durée $t_0 = 40$ ns et d'amplitude $\sigma_0 = 5$ GPa, suivi d'un créneau de même amplitude, les deux étant séparés d'un délais de t_0 . Ce signal permet de tester si des profils de pression particuliers font apparaître des erreurs dans les résultats numériques.

Paramètres numériques Le nombre de nœuds utilisés pour cette partie est de 500. Le nombre CFL sera amené à varier, de 1 à 0.2.

^{1.} Largement utilisé par la communauté LSP.

A.1.2 Solution numérique

La Figure A.1 présente les résultats des méthodes numériques, pour des valeurs du nombre CFL différentes, sous la forme de distributions spatiales des contraintes normalisées avec l'amplitude du chargement à l'instant t = 140 ns. Chaque résultat est comparé à la solution analytique, qui correspond dans le cas présent au signal de pression d'entrée translaté d'une distance $c_e t$, où c_e est la vitesse de propagation élastique du matériau considéré. Pour un matériau isotrope, elle est donnée par la formule suivante :

$$c_e = \sqrt{\frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)}}$$
(A.1)

Il est intéressant de remarquer que pour toutes les méthodes numériques testées, la solution pour un nombre CFL de 1 correspond exactement à la solution analytique.



FIGURE A.1 – Distribution spatiale de l'onde de contrainte normalisée à l'instant t = 140 ns pour différentes valeurs du nombre CFL. (a) Méthode de Lax-Friedrichs. (b) Méthode de Lax-Wendroff. (c) Méthode de Godunov. (d) Méthode de Godunov à haute résolution.

Les résultats de la Figure A.1 montrent que pour toutes les méthodes numériques, plus le nombre CFL est faible, plus la méthode numérique fait apparaître des artéfacts qui lui sont propres. Les méthodes de Lax-Friedrichs (Figure A.1a) et de Godunov (Figure A.1c) introduisent de la viscosité artificielle, ce qui les empêche de représenter correctement la partie créneau du chargement, et dans une moindre mesure la partie en semi-sinusoïde, malgré les variations continues de la contrainte. A l'inverse, la méthode de Lax-Wendroff introduit très peu de viscosité artificielle, causant l'apparition d'oscillations artificielles, dont l'amplitude augmente à mesure que le nombre CFL diminue. Ces oscillations sont particulièrement prononcées au voisinage des fortes variations de pressions. Ainsi, le profil continu de la semi-sinusoïde est presque parfaitement retranscrit. Enfin, la méthode de Godunov à

Haute Résolution présente de très bonnes performances, peu importe le nombre CFL ou le type de profil de chargement.

A.2 Propagation d'une onde de contrainte élastique dans un matériau hétérogène

Cette section sera consacrée à la détermination de la solution analytique de la propagation d'une onde de contrainte dans un matériau élastique hétérogène. L'échantillon contiendra ici une interface entre deux matériaux avec des propriétés différentes. Le Chapitre 3 traitant de la propagation d'une onde de contrainte dans un matériau laminé, il est utile de s'intéresser ici à cette situation. En particulier, la solution analytique permettra de juger de la qualité des méthodes numériques utilisables dans cette situation.

A.2.1 Paramètres du modèle

Paramètres matériau et géométriques La modélisation du problème suit les développements du Chapitre 2. La longueur du domaine spatial fait ici L = 5 mm, et l'interface entre les deux matériaux est placée à l = 1 mm. Pour cet exemple, les deux matériaux formant l'interface seront de raideur égale (donnée par leurs modules de Young E et coefficients de Poisson ν), mais avec des masses volumiques différentes. Ainsi $E_1 = E_2 = 210$ GPa, $\nu_1 = \nu_2 = 0.3$, $\rho_1 = 7800$ kg.m⁻³ et $\rho_2 = 2\rho_1^2$. Les vitesses de propagation élastique des deux phases sont notées $c_{e,1}$ et $c_{e,2}$.

Chargement et condition aux limites Le chargement consiste en un créneau de pression d'amplitude $\sigma_0 = 5$ GPa, durant une durée de $t_0 = 80$ ns. La forme en créneau du chargement permet de ne conserver que deux variations de pression, correspondant aux fronts de charge et de décharge, simplifiant la résolution analytique.

Paramètres numériques Le nombre de nœuds subdivisant le domaine est fixé à N = 500 et le nombre CFL à 0.9. Dans le cas d'un matériau hétérogène, il faut s'assurer que la condition CFL est respectée sur l'ensemble du domaine. Pour un incrément spatial Δx fixé, l'incrément temporel est ici donné par $\Delta t = \Delta x/c_{e,\max}$ CFL, où $c_{e,\max}$ correspond à la vitesse élastique maximale atteinte par l'onde dans le matériau. Cela assure que l'incrément de temps choisi est le plus petit possible, et que la condition CFL est respectée en chaque point du domaine spatial. Cependant, si la quantité $c_e \Delta t/\Delta x$ est égale au nombre CFL choisi dans le matériau avec la vitesse de propagation élastique la plus élevée, la même quantité sera plus faible dans l'autre matériau, ce qui peut causer l'apparition d'artéfacts numériques propres à la méthode numérique utilisée.

A.2.2 Solution analytique

La solution analytique se calcule par la méthode dite des caractéristiques. La solution ne prend pas la forme d'une équation, mais plutôt d'un graphe duquel il est possible de déduire les valeurs de

^{2.} Le choix de ne faire varier que la masse volumique est arbitraire, les méthodes et conclusions ne changeant pas si un autre paramètre avait été pris différent entre les deux matériaux

contrainte axiale et de vitesse axiale en tout point et tout instant de la propagation. Ce graphe, appelé diagramme x - t, contient des droites correspondant aux variations de contrainte et de vitesse, dont les pentes sont proportionnelles à l'inverse de la vitesse des fronts d'onde formés par ces variations de contrainte. Par ailleurs, il est possible de lier les variations de contraintes et de vitesses au niveau de ces fronts par la relation suivante [190] :

$$\llbracket \sigma \rrbracket = \pm \rho C \llbracket v \rrbracket, \tag{A.2}$$

où ρ et C correspondent à la masse volumique du matériau dans lequel se propage le front et la vitesse du front respectivement. Le symbole \pm correspond au sens de propagation du front d'onde selon le référentiel choisi : « + » si la propagation se fait dans le sens des x croissants, « - » dans le sens inverse. La notation [[.]] au niveau d'un front entre deux zones, notées 1 et 2 signifie un saut tel que $[\sigma] = \sigma_2 - \sigma_1$. Cette relation permet donc de faire le lien entre la contrainte et la vitesse à chaque instant et chaque point du diagramme x - t. La figure A.2 correspond au diagramme x - t de la propagation élastique dans un matériau hétérogène contenant une interface.



FIGURE A.2 – Diagramme x - t dans le cas d'une propagation élastique dans un matériau hétérogène [18]

La Figure A.2 fait apparaître différents fuseaux, correspondant à l'onde se propageant dans le matériau. Au niveau de l'interface, une partie de l'onde est transmise, tandis qu'une autre est réfléchie. Les variations de contrainte et vitesse incidentes entre l'avant et l'arrière du front d'onde (notées $\Delta \sigma_I$ et Δv_I), réfléchies (notées $\Delta \sigma_F$ et Δv_F) et transmises (notées $\Delta \sigma_T$ et Δv_T), sont liées par les relations suivantes [190] :

$$\begin{cases} \Delta \sigma_R = F \Delta \sigma_I \\ \Delta v_R = -F \Delta v_I \end{cases}, \begin{cases} \Delta \sigma_T = T \Delta \sigma_I \\ \Delta v_T = nT \Delta v_I \end{cases} \text{ avec } \begin{cases} F = \frac{1-n}{1+n} \\ T = \frac{2}{1+n} \\ n = \frac{\rho_1 c_1}{\rho_2 c_2} \end{cases}.$$
(A.3)

Des zones sont identifiées par des lettres allant de (a) à (g), avec des valeurs de contraintes et de vitesses correspondant à chacune. Le tableau A.1 résume les expressions de contraintes et de vitesses du diagramme x - t de la Figure A.2.

zone	σ	v
(a)	0	0
(b)	σ_0	$-rac{\sigma_0}{ ho_1 c_{e,1}}$
(c)	0	0
(d)	$T\sigma_0$	$\frac{\sigma_0 \left(T-2\right)}{\rho_1 c_{e,1}}$
(e)	$F\sigma_0$	$\frac{F\sigma_0}{\rho_1 c_{e,1}}$
(f)	0	0
(g)	$T\sigma_0$	$-rac{T\sigma_0}{ ho_2 c_{e,2}}$

TABLE A.1 – Valeurs de contraintes et vitesses du diagramme x - t de la Figure A.2 [18]

Ainsi, à l'aide de la Figure A.2 et du Tableau A.1, il est possible de tracer la distribution spatiale de la contrainte et vitesse axiale pour chaque instant de la propagation.

A.2.3 Solution numérique

La Figure A.3 compare les distributions spatiales de contrainte et vitesse axiales à l'instant t = 300ns obtenues avec la solution analytique et les méthodes numériques :



FIGURE A.3 – Comparaison des résultats entre la solution analytique de la propagation élastique dans un matériau hétérogène et différentes méthodes numériques à t = 300 ns. (a) Distribution spatiale de la contrainte axiale. (b) Distribution spatiale de la vitesse axiale.

Les résultats de la Figure A.3 montrent que toutes les méthodes numériques sont capables de donner une approximation de la propagation élastique de la contrainte et vitesse axiale dans un matériau hétérogène, les parties transmises et réfléchies de l'onde étant globalement représentées. Ces résultats permettent une fois de plus de juger des performances d'une méthode numérique par rapport à une autre. De manière similaire à la Figure A.1, la méthode de Lax-Wendroff (LW) introduit des oscillations artificielles, tandis que celles de Lax-Friedrichs (LF) et de Godunov introduisent de la

viscosité artificielle. Encore une fois, la méthode de Godunov à Haute Résolution (GHR) parvient le mieux à suivre la solution analytique.

Il est également intéressant d'analyser les performances de la solution donnée par le code commercial ABAQUS. Les calculs précédents ont été effectués par un modèle 1D, ce qui n'est pas réalisable directement sur ABAQUS. Il est cependant possible d'approximer correctement une modélisation 1D en réalisant un calcul axysymétrique avec une tache laser de grande taille. De cette manière, les ondes radiales se propageant depuis les bords de la tache laser et perturbant la solution au niveau de l'axe d'axysymétrie mettent longtemps à arriver, et la solution donnée par ABAQUS peut être comparée à celle données par les modèles 1D pour les instants qui nous intéressent. Pour les calculs sur ABAQUS, le diamètre de tache laser considéré sera de 15 mm.

Comme présenté dans le Chapitre 1 Section 1.8.1, ABAQUS possède un paramètre permettant de régler la viscosité artificielle de la solution, afin d'éviter des artéfacts numériques de types oscillations artificielles. Ce paramètre, bien que pratique, est difficile à interpréter physiquement. Nous présenterons donc les résultats donnés par ABAQUS pour des paramètres *par défaut* de viscosité artificielle, et pour des paramètres de viscosité artificielle nuls. Les résultats présentés sur la Figure A.4 correspondent aux valeurs de contraintes sur l'axe de symétrie du modèle.



FIGURE A.4 – Comparaison des résultats en contrainte entre la solution analytique de la propagation élastique dans un matériau hétérogène et différentes méthodes numériques à t = 300 ns. « Abaqus défaut » dénote la solution ABAQUS avec les paramètres de viscosité artificielle par défaut, tandis que « Abaqus ss visc » dénote la solution avec des paramètres de viscosité artificielle nuls.

Il apparaît dans la Figure A.4 que la solution donnée par ABAQUS lorsque les paramètres par défaut sont utilisés parvient bien à reproduire la solution analytique. Ses performances sont équivalentes à celle de la méthode de Godunov, mais inférieures à celle de la méthode de Godunov à haute résolution. En revanche, en l'absence de viscosité artificielle, cette même solution est dégradée, et des oscillations artificielles apparaissent à l'arrière des fronts de charge et de décharge (l'onde réfléchie sur la partie gauche de la Figure A.4 se propage dans la direction des x négatifs).

A.3 Propagation d'une onde de contrainte élasto-plastique dans un matériau homogène

Cette section se focalisera sur la détermination de la solution analytique dans le cas d'une propagation élasto-plastique dans un matériau homogène. La plasticité induit des phénomènes particuliers dans la propagation de l'onde, notamment des différences de vitesses de propagation entre les parties élastiques et plastiques de l'onde. De la même manière que dans les sections A.1 et A.2, la solution analytique permettra de juger de la qualité des méthodes numériques, ici dans le cas de la propagation élasto-plastique en milieu homogène. De tels résultats peuvent être trouvés dans les travaux de Ballard [18], Julan et al. [96] et Heuzé [84]. Deux cas seront étudiés, correspondant à deux amplitudes de chargement différentes, inférieures et supérieures à $2\sigma_{\text{HEL}}$, σ_{HEL} correspondant à la limite élastique d'Hugoniot. Dans chaque cas, le comportement élasto-plastique de l'onde est différent.

A.3.1 Paramètres du modèle

Paramètres matériau et géométriques La modélisation du problème est similaire aux sections A.1 et A.2. La longueur du domaine spatial est L = 5 mm. Le matériau considéré ici est Elastique Parfaitement Plastique (EPP), avec comme module de Young E = 210 GPa, coefficient de Poisson $\nu = 0.3$, masse volumique $\rho = 7800$ kg.m⁻³ et limite élastique $\sigma_Y = 870$ MPa. La limite élastique d'Hugoniot est donnée par

$$\sigma_{\rm HEL} = \sigma_Y \frac{1-\nu}{1-2\nu}.\tag{A.4}$$

Ainsi dans le cas présent $\sigma_{\text{HEL}} = 1522.5$ MPa.

Chargement et condition aux limites Comme pour la Section A.2, afin de faciliter l'obtention de la solution analytique, le chargement consiste en un créneau de pression d'amplitude σ_0 , durant une durée de $t_0 = 80$ ns. La valeur de l'amplitude de contrainte considérée influence grandement le comportement de l'onde de contrainte élasto-plastique. Deux cas seront donc traités séparément, l'un correspondant à une valeur de pression σ_0 telle que $\sigma_0 \leq 2\sigma_{\text{HEL}}$, l'autre pour $\sigma_0 > 2\sigma_{\text{HEL}}$.

Paramètres numériques Le nombre de nœuds subdivisant le domaine est fixé à N=500 et le nombre CFL à 0.9.

A.3.2 Cas d'une amplitude de pression σ_0 telle que $\sigma_0 \leq 2\sigma_{\text{HEL}}$

A.3.2.1 Solution analytique

L'amplitude de pression appliquée sera ici de $\sigma_0 = 2$ GPa, inférieure à $2\sigma_{\text{HEL}}$. Dans ces conditions, la plasticité n'est induite que par le front de charge de l'onde, et la déformation plastique est proportionnelle à la pression appliquée [18]. Le diagramme x - t de cette situation est présenté dans la Figure A.5.



FIGURE A.5 – Diagramme x - t dans le cas d'une propagation élasto-plastique dans un matériau homogène, avec une pression appliquée de 2 GPa.

Le diagramme x - t de la propagation élasto-plastique de la Figure A.5 fait apparaître un front de charge plastique, se propageant à une vitesse différente du front de charge élastique. La vitesse de propagation d'une onde de contrainte c est donnée par la relation suivante :

$$c = \sqrt{\frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon}},\tag{A.5}$$

où σ et ε sont la contrainte et la déformation, respectivement, dans la direction de la propagation³. Ainsi, la plasticité se traduisant par une baisse de rigidité, la vitesse de propagation est plus faible dans le domaine plastique que dans le domaine élastique. Dans le cas particulier d'un champ de déformation totale uniaxial et d'un matériau isotrope EPP, la vitesse de propagation plastique c_p est donnée par [18] :

$$c_p = \sqrt{\frac{E}{3\rho(1-2\nu)}}.\tag{A.6}$$

Cette expression et l'Equation (A.1) vérifient $c_e > c_p$, d'où la représentation du front de charge plastique sur la Figure A.5 par une droite de coefficient directeur différent de celui du front de charge élastique.

Les vitesses élastiques et plastiques étant différentes, le problème se rapproche de celui d'une onde de se propageant à travers une interface, tel qu'étudié dans la Section A.2, à la différence que l'interface est ici mobile : elle correspond au front de charge plastique. Ainsi, lorsque le front de décharge élastique rattrape le front de charge plastique, des ondes réfléchies et transmises sont émises. Cette interaction du front de décharge élastique avec le front de charge plastique a pour effet de diminuer l'amplitude de l'onde. Dans le cas présent, après cette interaction, l'amplitude est diminuée jusqu'à une valeur inférieure au seuil de plasticité. Le front de charge plastique disparaît donc au profit du front de décharge élastique.

Comme pour la Figure A.2, il est possible de déterminer les valeurs de contraintes et vitesses associées aux différentes zones du diagramme x - t. Notamment, la contrainte dans la zone (b) de la

^{3.} Ici le champ de déplacement et l'état de déformation sont uniaxiaux, mais pas l'état de contrainte. Il est donc possible d'avoir $\partial \sigma / \partial \varepsilon \neq 0$ lorsque la déformation plastique est non nulle avec un modèle élastique parfaitement plastique, tout en ayant $\partial \sigma_{eq} / \partial \varepsilon = 0$, σ_{eq} étant une contrainte équivalente.

Figure A.5 correspond à la contrainte axiale maximale atteignable sans que le matériau ne plastifie, soit σ_{HEL} . La contrainte axiale augmente ensuite jusqu'à la pression appliquée dans la zone (c). Selon les travaux de Ballard [18], le matériau plastifie dans la phase de décharge lorsque la contrainte axiale atteint la valeur de $\sigma_0 - 2\sigma_{\text{HEL}}$. Or par hypothèse, $\sigma_0 \leq 2\sigma_{\text{HEL}}$. La contrainte axiale revient donc à zéro à la fin du front de décharge sans plastifier le matériau. Les résultats sont résumés dans le Tableau A.2 :

zone	σ	v
(a)	0	0
(b)	$\sigma_{ m HEL}$	$-rac{\sigma_{ ext{HEL}}}{ ho c_e}$
(c)	σ_0	$\frac{\sigma_{\text{HEL}}}{\rho} \left(\frac{1}{c_p} - \frac{1}{c_e} \right) - \frac{\sigma_0}{\rho c_p}$
(d)	0	$rac{1}{ ho}\left(rac{1}{c_p}-rac{1}{c_e} ight)\left(\sigma_{ m HEL}-\sigma_0 ight)$
(e)	$\frac{1}{2} \left(1 - \frac{c_e}{c_p} \right) \left(\sigma_{\text{HEL}} - \sigma_0 \right)$	$\frac{1}{2\rho} \left(\sigma_{\rm HEL} - \sigma_0 \right) \left(\frac{1}{c_p} - \frac{1}{c_e} \right)$

TABLE A.2 – Valeurs de contraintes et vitesses du diagramme x - t de la Figure A.5.

Il est intéressant de constater que malgré la contrainte nulle dans la zone (d) après le passage de l'onde, la vitesse correspondante est non nulle. L'évolution plastique du matériau introduit donc un état de vitesse résiduel.

L'utilisation des valeurs de ce tableau avec la Figure A.5 permet de nouveau de déterminer les valeurs de contrainte et de vitesse en tout point du domaine et pour tout instant de la propagation.

A.3.2.2 Solution numérique

Il est maintenant possible de comparer les résultats des différentes méthodes numériques avec la solution analytique pour une amplitude de pression ne causant pas de plastification lors de la décharge. Cette comparaison est effectuée sur les distributions spatiales de contrainte et de vitesse à l'instant t = 200 ns, et est présentée sur la Figure A.6.



FIGURE A.6 – Comparaison des résultats entre la solution analytique de la propagation élasto-plastique dans un matériau homogène et différentes méthodes numériques à t = 200 ns pour une pression de 2 GPa. (a) Distribution spatiale de la contrainte axiale. (b) Distribution spatiale de la vitesse axiale.

Les résultats en contrainte et en vitesse de la Figure A.6 font correctement apparaître les prédictions de la solution analytique, telle que le précurseur élastique (Figure A.6a et b) et l'état de vitesse résiduel (Figure A.6b). Conformément aux attentes, la solution numérique donnée par le schéma de Lax-Wendroff présente quelques oscillations artificielles, tandis que celles obtenues avec les schémas de Lax-Friedrichs et Godunov introduisent de la viscosité artificielle. Seul le schéma de Godunov à Haute Résolution parvient à représenter fidèlement la solution analytique, en particulier les changements abruptes de contrainte et de vitesse.

Nous présentons de nouveaux les résultats donnés par ABAQUS, avec et sans viscosité artificielle. Ces résultats sont comparés aux solutions données par le schéma de Godunov et de Godunov à haute résolution (GHR). Ces résultats sont présentés sur la Figure A.7. Comme pour la Section A.2.3, la solution ABAQUS correspond aux valeurs des contraintes sur l'axe de symétrique d'une modélisation axisymétrique, dont le diamètre de la zone sur laquelle le chargement est appliquée est de 15 mm.



FIGURE A.7 – Comparaison des résultats en contrainte entre la solution analytique de la propagation élasto-plastique dans un matériau homogène et différentes méthodes numériques à t = 200 ns pour une pression de 2 GPa. « Abaqus défaut » dénote la solution ABAQUS avec les paramètres de viscosité artificielle par défaut, tandis que « Abaqus ss visc » dénote la solution avec des paramètres de viscosité artificielle nuls.

Les résultats de la Figure A.7 montrent que le logiciel ABAQUS pour des paramètres par défaut produit une solution dont la qualité rivalise avec celle des méthodes de Godunov et de Godunov à haute résolution (tout en restant moins performante que cette dernière). En revanche, lorsqu'aucune viscosité artificielle n'est introduite, de fortes oscillations apparaissent au niveau du front de décharge, de manière semblable à ce que peut donner le schéma de Lax-Wendroff (voir Figure A.6).

A.3.3 Cas d'une amplitude de pression σ_0 telle que $\sigma_0 > 2\sigma_{\text{HEL}}$

A.3.3.1 Solution analytique

L'amplitude de pression appliquée est ici de $\sigma_0 = 5$ GPa. Une telle amplitude va provoquer une nouvelle évolution plastique du matériau durant le front de décharge à l'arrière de l'onde. D'après Ballard [18], cette nouvelle évolution plastique se produit dès que la contrainte axiale atteint la valeur $\sigma_0 - 2\sigma_{\text{HEL}}^4$. A cette situation correspond un nouveau diagramme x - t en Figure A.8, différent de celui présenté en Figure A.5.

^{4.} Cette valeur se détermine en calculant la valeur de contrainte pour laquelle la contrainte équivalente est égale à la limite élastique, en prenant en compte qu'une déformation plastique a été introduite au préalable durant la plastification par le front de charge.



FIGURE A.8 – Diagramme x - t dans le cas d'une propagation dans un matériau homogène élastoplastique, avec une pression appliquée de 5 GPa (voir également [18]).

Le diagramme x - t de la Figure A.8 fait apparaître des phénomènes de propagation d'onde complexes. Le front de décharge élastique est maintenant encadré au début de la propagation par les fronts de charge et décharge plastiques. A cause des différences de vitesses de propagation, le front de décharge élastique « rebondi » sur les fronts plastiques (visible par la séparation entre les zones (d) et (f) de la Figure A.8). Contrairement au cas où $\sigma_0 \leq 2\sigma_{\text{HEL}}$, le front de charge plastique est atténué à la deuxième interaction avec le front de décharge élastique.

Les valeurs de contraintes des zones (a) à (e) de la Figure A.8 peuvent se déterminer par l'amplitude du chargement, et par détermination des valeurs de contraintes provoquant l'évolution plastique du matériau en charge et en décharge. Les valeurs de vitesses sont calculées grâce à la formule (A.2). Pour les zones suivantes (ici (f) et (g)), l'analyse devient plus complexe, mais il est possible de tirer profit du fait que ces zones sont adjacentes à deux autres zones dont les contraintes et vitesses correspondantes sont connues ou peuvent être déterminées. Ainsi, l'application de la formule (A.2) pour les deux fronts (par exemple (d) et (b) pour la zone (f)) produit un système de deux équations à deux inconnues, dont la résolution donne la contrainte et la vitesse de la zone correspondante. Par exemple la détermination de la contrainte et la vitesse dans la zone (f) se fait par la résolution de :

$$\begin{cases} \sigma_{(f)} - \sigma_{(d)} = \rho c_e \left(v_{(f)} - v_{(d)} \right) \\ \sigma_{(f)} - \sigma_{(b)} = -\rho c_p \left(v_{(f)} - v_{(b)} \right) \end{cases}$$
(A.7)

Les valeurs de contrainte et vitesse correspondant au diagramme x - t de la Figure A.8 sont résumées dans le Tableau A.3.

zone	σ	v
(a)	0	0
(b)	$\sigma_{ m HEL}$	$-\frac{\sigma_{ ext{HEL}}}{ ho c_e}$
(c)	σ_0	$rac{\sigma_{ ext{HEL}}}{ ho}\left(rac{1}{c_p}-rac{1}{c_e} ight)-rac{\sigma_0}{ ho c_p}$
(d)	$\sigma_0 - 2\sigma_{ m HEL}$	$rac{\sigma_{ ext{HEL}}}{ ho}\left(rac{1}{c_p}+rac{1}{c_e} ight)-rac{\sigma_0}{ ho c_p}$
(e)	0	$rac{\sigma_{ ext{HEL}}}{ ho}\left(rac{1}{c_e}-rac{1}{c_p} ight)$
(f)	$\sigma_0 - 4 rac{c_p}{c_e + c_p} \sigma_{ m HEL}$	$\frac{\sigma_{\text{HEL}}}{\rho} \left(\frac{1}{c_p} - \frac{1}{c_e} + \frac{4}{c_e + c_p} \right) - \frac{\sigma_0}{\rho c_p}$
(g)	$\frac{1}{2} \left[2\sigma_{\text{HEL}} \left(c_e - c_p \right) \left(\frac{1}{c_p} + \frac{2}{c_e + c_p} \right) + \sigma_0 \left(1 - \frac{c_e}{c_p} \right) \right]$	$\frac{c_p - c_e}{\rho c_e c_p \left(c_e + c_p\right)} \left(\frac{\sigma_0}{2} \left(c_p + c_e\right) - 2\sigma_{\text{HEL}} c_p\right)$

TABLE A.3 – Valeurs de contraintes et vitesses du diagramme x - t de la Figure A.8 [18].

La Figure A.8, utilisée avec le Tableau A.3 permet de déterminer les valeurs de contraintes et de vitesses en tout point de l'échantillon, et pour tout instant de la propagation.

A.3.3.2 Solution numérique

Il est maintenant possible pour le cas présent de comparer les résultats des méthodes numériques avec la solution analytique. La Figure A.9 présente les distributions spatiales de contrainte et de vitesse lors de la propagation à l'instant t = 250 ns.



FIGURE A.9 – Comparaison des résultats entre la solution analytique de la propagation élasto-plastique dans un matériau homogène et différentes méthodes numériques à t = 250 ns pour une pression de 5 GPa. (a) Distribution spatiale de la contrainte axiale. (b) Distribution spatiale de la vitesse axiale.

Les résultats de la Figure A.9 montrent que les méthodes numériques parviennent à approximer correctement la solution analytique, en contrainte et en vitesse. Le précurseur élastique est de nou-

veau correctement modélisé, ainsi que la plasticité induite au niveau de la décharge. Les méthodes numériques livrent des performances relativement similaires, avec encore une fois un avantage pour la méthode de Godunov à Haute Résolution, qui est la méthode numérique qui introduit le moins de viscosité pour cet exemple de propagation élasto-plastique.

Pour ce cas test, nous analysons également la solution donnée par le logiciel ABAQUS, avec et sans viscosité artificielle. Ces résultats sont présentés dans la Figure A.10. Comme précédemment, nous nous intéressons aux valeurs de contraintes sur l'axe de symétrie d'un modèle axysymétrique. Le diamètre de la surface recevant le chargement est de 15 mm.



FIGURE A.10 – Comparaison des résultats en contraintes entre la solution analytique de la propagation élasto-plastique dans un matériau homogène et différentes méthodes numériques à t = 250 ns pour une pression de 5 GPa. « Abaqus défaut » dénote la solution ABAQUS avec les paramètres de viscosité artificielle par défaut, tandis que « Abaqus ss visc » dénote la solution avec des paramètres de viscosité artificielle nuls.

Les résultats de la Figure A.10 montrent que le logiciel ABAQUS permet d'aboutir à des résultats proches de la solution analytique lorsque des paramètres par défaut sont utilisés. Ici, ces résultats sont légèrement meilleurs que ceux de la méthode de Godunov, mais toujours inférieurs à ceux de la méthode e Godunov à haute résolution. Cependant, l'absence de viscosité artificielle conduit à des écarts, de nouveau sous la forme d'oscillations artificielles.

A.3.4 Comparaison des méthodes de calcul de la plasticité

Nous comparons enfin dans une dernière sous-partie les différentes méthodes proposées dans ce manuscrit permettant de calculer la propagation élasto-plastique dans le cas d'une propagation uniaxiale. Ces méthodes peuvent être trouvées en détail dans les Sections 2.2.1 et 3.2.3.2. Pour rappel, la première méthode, appelée ici « advection plastique » consiste à résoudre l'équation d'advection lorsque le critère de plasticité est violé avec le module tangent élasto-plastique⁵. La deuxième méthode consiste à appliquer un retour radial lorsque le critère de plasticité est violé. Nous illustrons ces deux méthodes sur le cas présenté dans le Section A.3.3, avec le schéma de Godunov à Haute

^{5.} Cette méthode a été utilisée pour les calculs précédents de cette annexe.



Résolution. Les résultats sont présentés dans la Figure A.11.

FIGURE A.11 – Comparaison des méthodes de calcul de la propagation élasto-plastique à t = 250 ns. « advection plastique » dénote la solution obtenue en résolvant l'équation d'advection avec le module tangent, « retour radial » dénote la solution obtenue en appliquant une procédure de retour radial.

La Figure A.11 montrent que les deux méthodes de calculs parviennent convenablement à suivre la solution analytique. En revanche, la méthode par retour radial introduit de la viscosité artificielle par rapport à l'advection plastique. Cela s'explique par le fait qu'avec cette dernière méthode, la correction se fait en utilisant le schéma numérique choisit pour la propagation, et en possède donc les mêmes propriétés numériques. L'approche par advection plastique présente cependant des inconvénients par rapport au retour radial. Elle a pu être ici facilement appliquée grâce aux hypothèses de déformations uniaxiales et de matériau parfaitement plastique, qui permettent alors de calculer simplement le module tangent élasto-platique dans la direction du choc, qui est dans ce cas constant. Un tel calcul n'est plus possible dès lors que de l'écrouissage est introduit, ou qu'un modèle 2D est utilisé. Avec de l'écrouissage, la vitesse de propagation plastique dépend alors de la déformation plastique, et il serait alors nécessaire d'y ajouter une procédure de point fixe pour mettre à jour la déformation plastique (à partir de l'incrément de contrainte calculé avec l'advection élastique), de calculer le nouveau module tangent, qui est alors utilisé pour calculer un nouvel incrément de contrainte via la propagation. C'est dans ce cas que le retour radial trouve son utilité, l'état de contrainte final étant calculé de sorte que le critère de plasticité soit respecté. Bien qu'introduisant de la viscosité artificielle, cette méthode permet donc de traiter de manière générale plusieurs types d'écrouissage, tout en économisant des étapes de calcul. Dans le cas du Chapitre 4, il est de nouveau préférable de procéder par correction plastique suite à une étape de propagation que par une équation d'advection plastique. En effet dans ce cas, la haute non-linéarité du modèle visco-plastique en plasticité cristalline utilisé rendrait alors le calcul d'un module tangent complexe, qui nécessiterait alors une procédure similaire à celle utilisée pour calculer les incréments des multiplicateurs plastiques des systèmes de glissement. De plus, une erreur dans le module tangent se répercuterait directement dans l'équation d'advection plastique, et introduirait alors de nouvelles erreurs en cascade. L'usage d'une correction plastique après une étape de propagation permet donc d'alléger les temps de calcul, et de limiter les risques d'erreurs numériques.

A.4 Conclusion

L'objectif de cette annexe fut d'étudier les performances de méthodes numériques considérées dans le corps du manuscrit : les méthodes de Lax-Friedrichs, Lax-Wendroff, Godunov et Godunov à haute résolution. Ces méthodes ont été testées dans plusieurs situations. La première d'entre elles est la propagation d'une onde de contrainte dans un matériau élastique homogène, avec différents nombres CFL (paramètre numérique contrôlant la relation entre les incréments spatiaux et temporels et la vitesse de propagation élastique). Ces premiers résultats font apparaître que les méthodes numériques, comparées avec une solution exacte, introduisent des erreurs (viscosité et oscillations artificielles) dans la résolution au fur et à mesure que le nombre CFL diminue. Seule la méthode de Godunov à Haute Résolution est peu affectée par ces variations du nombre CFL. De manière générale, les incréments spatiaux et temporels sont des paramètres uniques pour une simulation donnée, tandis que la vitesse de propagation, dépendante des propriétés matériaux, peut changer. Dans le cas d'un matériau hétérogène, le nombre CFL n'est donc plus uniforme, et il est important de quantifier son influence sur la propagation. Le cas d'une propagation dans un matériau élastique hétérogène correspond au second test des méthodes numériques. Une onde de contrainte est propagée dans un échantillon présentant une interface entre deux matériaux différents, donnant lieu à des ondes transmises et réfléchies. Là encore. la comparaison entre les méthodes numériques et la solution analytique montre que la méthode de Godunov à Haute Résolution introduit peu d'erreurs dans la résolution. Enfin, une troisième et dernière situation est présentée, celle de la propagation dans un matériau homogène élastique parfaitement plastique. Dans ce cas, la solution analytique fait apparaître des phénomènes particuliers d'interfaces entre les parties élastiques et plastiques de l'onde, ainsi qu'une dépendance de la forme (présence ou non de décharge plastique) l'onde à la pression appliquée. Ce dernier cas finit de confirmer que la méthode de Godunov à Haute Résolution produit de très bons résultats pour la propagation d'une onde de contrainte, quelle que soit la modélisation du matériau. Le logiciel ABAQUS est quant à lui un outil pertinent pour modéliser la propagation d'ondes de contraintes d'un point de vue numérique. Il convient cependant de garder en tête que les paramètres de viscosité artificielle par défaut permettent une telle qualité de résultats. Sans ces derniers des erreurs numériques apparaissent dans la solution, et l'utilisation du logicielle n'est plus recommandée. De plus, les chargements utilisés dans cette annexe, des créneaux de contraintes, sont utiles pour observer au mieux les performances des méthodes numériques, mais sont peu communs pour nos applications. Des chargements continus devraient engendrer moins de différences entre les méthodes numériques.

A.4. CONCLUSION

Annexe B

Modèle élasto-plastique effectif

B.1 Tenseur des rigidités effectif $\widetilde{\mathbb{C}}$

Nous donnons ici les détails sur la démonstration du tenseur de rigidité effective \mathbb{C} pour la laminé à deux phases. La preuve est basée sur les développements et les résultats de Postma [156], He and Feng [83] et Milton [127], mais donnée dans le cas plus général de phases à comportement isotrope transverse (tenseur exprimé dans le repère principal, et en notation de Kelvin) :

$$\mathbb{C} = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1122} & C_{2222} & C_{2233} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1122} & C_{2233} & C_{2222} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2C_{2323} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2C_{1313} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2C_{1313} \end{pmatrix},$$
(B.1)

avec $2C_{2323}=C_{2222}-C_{2233}.$ Exprimons d'abord les composantes diagonales non uniformes des champs mécaniques :

$$\begin{cases} \varepsilon_{e,11} = \frac{\sigma_{11}}{C_{1111}} - \frac{C_{1122}}{C_{1111}}\varepsilon_{e,22} - \frac{C_{1122}}{C_{1111}}\varepsilon_{e,33} \\ \sigma_{22} = C_{1122}\varepsilon_{e,11} + C_{2222}\varepsilon_{e,22} + C_{2233}\varepsilon_{e,33} \\ \sigma_{33} = C_{1122}\varepsilon_{e,11} + C_{2233}\varepsilon_{e,22} + C_{2222}\varepsilon_{e,33}. \end{cases}$$
(B.2)

Le système (B.2) s'écrit alors alternativement en injectant la première équation du système dans les deux autres, et en identifiant les quantités uniformes (données par l'équation (3.25)) :

$$\begin{cases} \varepsilon_{e,11} = \frac{\overline{\sigma}_{11}}{C_{1111}} - \frac{C_{1122}}{C_{1111}} \overline{\varepsilon}_{e,22} - \frac{C_{1122}}{C_{1111}} \overline{\varepsilon}_{e,33} \\ \sigma_{22} = \frac{C_{1122}}{C_{1111}} \overline{\sigma}_{11} + \left(C_{2222} - \frac{(C_{1122})^2}{C_{1111}}\right) \overline{\varepsilon}_{e,22} + \left(C_{2233} - \frac{(C_{1122})^2}{C_{1111}}\right) \overline{\varepsilon}_{e,33} \\ \sigma_{33} = \frac{C_{1122}}{C_{1111}} \overline{\sigma}_{11} + \left(C_{2233} - \frac{(C_{1122})^2}{C_{1111}}\right) \overline{\varepsilon}_{e,22} + \left(C_{2222} - \frac{(C_{1122})^2}{C_{1111}}\right) \overline{\varepsilon}_{e,33}. \end{cases}$$
(B.3)

En prenant la moyenne spatiale du système (B.3), nous obtenons :

$$\left\{ \begin{array}{l} \overline{\varepsilon}_{e,11} = \langle \varepsilon_{e,11} \rangle = \left\langle \frac{1}{C_{1111}} \right\rangle \overline{\sigma}_{11} - \left\langle \frac{C_{1122}}{C_{1111}} \right\rangle \overline{\varepsilon}_{e,22} - \left\langle \frac{C_{1122}}{C_{1111}} \right\rangle \overline{\varepsilon}_{e,33} \\ \overline{\sigma}_{22} = \langle \sigma_{22} \rangle = \left\langle \frac{C_{1122}}{C_{1111}} \right\rangle \overline{\sigma}_{11} + \left(\langle C_{2222} \rangle - \left\langle \frac{(C_{1122})^2}{C_{1111}} \right\rangle \right) \overline{\varepsilon}_{e,22} + \left(\langle C_{2233} \rangle - \left\langle \frac{(C_{1122})^2}{C_{1111}} \right\rangle \right) \overline{\varepsilon}_{e,33} \\ \overline{\sigma}_{33} = \langle \sigma_{33} \rangle = \left\langle \frac{C_{1122}}{C_{1111}} \right\rangle \overline{\sigma}_{11} + \left(\langle C_{2233} \rangle - \left\langle \frac{(C_{1122})^2}{C_{1111}} \right\rangle \right) \overline{\varepsilon}_{e,22} + \left(\langle C_{2222} \rangle - \left\langle \frac{(C_{1122})^2}{C_{1111}} \right\rangle \right) \overline{\varepsilon}_{e,33}.$$

$$(B.4)$$

Cela conduit à l'expression des composantes \tilde{C}_{1111} , \tilde{C}_{2222} , \tilde{C}_{1122} and \tilde{C}_{2233} du tenseur des rigidités effectif :

$$\widetilde{C}_{1111} = \left\langle \frac{1}{C_{1111}} \right\rangle^{-1}, \quad \widetilde{C}_{2222} = \left\langle C_{2222} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{C_{1111}} \right\rangle^{-1} \left\langle \frac{C_{1122}}{C_{1111}} \right\rangle^{2} - \left\langle \frac{(C_{1122})^{2}}{C_{1111}} \right\rangle, \\
\widetilde{C}_{1122} = \left\langle \frac{1}{C_{1111}} \right\rangle^{-1} \left\langle \frac{C_{1122}}{C_{1111}} \right\rangle, \quad \widetilde{C}_{2233} = \left\langle C_{2233} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{C_{1111}} \right\rangle^{-1} \left\langle \frac{C_{1122}}{C_{1111}} \right\rangle^{2} - \left\langle \frac{(C_{1122})^{2}}{C_{1111}} \right\rangle.$$
(B.5)

La détermination des coefficients de cisaillement du tenseur de rigidité effective suit un raisonnement similaire. Exprimons d'abord les composantes hors-diagonale non uniformes des champs mécaniques (en termes des composantes uniformes) :

$$\begin{cases} \varepsilon_{e,13} = \frac{\overline{\sigma}_{13}}{C_{1313}} \\ \varepsilon_{e,12} = \frac{\overline{\sigma}_{12}}{C_{1313}} \\ \sigma_{23} = C_{2323}\overline{\varepsilon}_{e,23}. \end{cases}$$
(B.6)

En prenant la moyenne spatiale du système (B.6), nous obtenons les expressions de \tilde{C}_{1212} , \tilde{C}_{1313} and \tilde{C}_{2323} :

$$\widetilde{C}_{1212} = \widetilde{C}_{1313} = \left\langle \frac{1}{C_{1313}} \right\rangle^{-1}, \quad \widetilde{C}_{2323} = \left\langle C_{2323} \right\rangle.$$
(B.7)

Since $2C_{2323} = C_{2222} - C_{2233}$, one also has $2\tilde{C}_{2323} = \tilde{C}_{2222} - \tilde{C}_{2233}$.

Le cas isotrope considéré dans le Chapitre 3 est obtenu en utilisant les résultats de cette annexe avec $C_{2233} = C_{1122}, C_{2222} = C_{1111}$ et $C_{2323} = C_{1313}$.

B.2 Modèle plastique effectif

Nous détaillons maintenant les développements conduisant à la détermination des conditions sur la contrainte macroscopique $\overline{\sigma}$ pour lesquelles les phases locales atteignent la plasticité, donnée par des équations (3.37), (3.38), (3.39), (3.40) et (3.41). Nous soulignons que seule la valeur de $\overline{\sigma}_{11}$ est nécessaire pour évaluer la plasticité locale, mais les conditions seront données en termes de $\overline{\sigma}_{11} - \overline{\sigma}_{22}$ afin de définir un critère macroscopique dont la structure suit le critère de plasticité locale (3.11).

B.2.1 Une seule phase plastifie

Nous commençons par calculer les expressions des coefficients $\beta^{(i)}$ utilisés dans les Equations (3.38) et (3.40). Les développements seront réalisés dans le cas où la phase 1 atteint la plasticité avant la phase 2. Nous partons de la définition de $\overline{\varepsilon}_{11}$:

$$\dot{\overline{\varepsilon}}_{11} = f_1 \dot{\varepsilon}_{11}^{(1)} + f_2 \dot{\varepsilon}_{11}^{(2)}. \tag{B.8}$$

En tirant parti de l'uniformité de la contrainte axiale et de la définition du coefficient α défini dans l'Equation (3.17), nous pouvons exprimer $\dot{\varepsilon}_{11}^{(2)}$ comme une fonction de $\dot{\varepsilon}_{11}^{(1)}$

$$\dot{\varepsilon}_{11}^{(2)} = \frac{C_{1111}^{(1)} \left(1 - \alpha^{(1)}\right) + \alpha^{(1)} C_{1122}^{(1)}}{C_{1111}^{(2)}} \dot{\varepsilon}_{11}^{(1)}.$$
(B.9)

En substituant (B.9) dans (B.8), nous obtenons

$$\dot{\varepsilon}_{11}^{(1)} = \left(f_1 + f_2 \frac{C_{1111}^{(1)} + \left(C_{1122}^{(1)} - C_{1111}^{(1)}\right)\alpha^{(1)}}{C_{1111}^{(2)}}\right)^{-1} \dot{\overline{\varepsilon}}_{11} = \beta^{(1)} \dot{\overline{\varepsilon}}_{11}.$$
(B.10)

Toujours en considérant que la phase 1 atteint la plasticité avant la phase 2, l'expression des $\beta^{(2)}$ est :

$$\beta^{(2)} = \left(f_2 + f_1 \frac{C_{1111}^{(2)}}{C_{1111}^{(1)} + \left(C_{1122}^{(1)} - C_{1111}^{(1)}\right) \alpha^{(1)}} \right)^{-1}.$$
 (B.11)

Trajet de chargement caractérisé par $\dot{\overline{\varepsilon}}_{11} > 0$ Afin d'évaluer l'état de contrainte macroscopique pour lequel l'évolution devient plastique, nous évaluons le critère de plasticité locale; le critère de plasticité locale (2.1)₄ devient :

$$\left(1 - \frac{C_{1122}}{C_{1111}}\right)\sigma_{11} + \left(\frac{(C_{1122})^2}{C_{1111}} - \frac{C_{2222} + C_{2233}}{2}\right)\varepsilon_{p,11} = \sigma_Y.$$
(B.12)

Puisque σ_{11} est uniforme dans le laminé (i.e. $\sigma_{11} = \overline{\sigma}_{11}$), nous pouvons en déduire la valeur de $\overline{\sigma}_{11}$ pour laquelle la plasticité locale commence, noté par $\overline{\sigma}^{(+)}$:

$$\overline{\sigma}^{(+)} = \min_{(i)} \left(\frac{C_{1111}^{(i)}}{C_{1111}^{(i)} - C_{1122}^{(i)}} \left[\sigma_Y^{(i)} - \left(\frac{(C_{1122}^{(i)})^2}{C_{1111}^{(i)}} - \frac{C_{2222}^{(i)} + C_{2233}^{(i)}}{2} \right) \varepsilon_{p,11}^{(i)} \right] \right).$$
(B.13)

L'évolution reste élastique tant que $\overline{\sigma}_{11} \leq \overline{\sigma}^{(+)}$, i.e. tant que :

$$\overline{\sigma}_{11} - \overline{\sigma}_{22} \le \left(1 - \frac{\widetilde{C}_{1122}}{\widetilde{C}_{1111}}\right) \overline{\sigma}^{(+)} + \widetilde{\varepsilon}_{p,22} \left(\widetilde{C}_{2222} + \widetilde{C}_{2233} - \frac{2\widetilde{C}_{1122}^2}{\widetilde{C}_{1111}}\right).$$
(B.14)

Trajet de chargement caractérisé par $\dot{\bar{\varepsilon}}_{11} < 0$ Dans ce cas, le critère de plasticité locale est satisfait lorsque

$$\left(1 - \frac{C_{1122}}{C_{1111}}\right)\sigma_{11} + \left(\frac{(C_{1122})^2}{C_{1111}} - \frac{C_{2222} + C_{2233}}{2}\right)\varepsilon_{p,11} = -\sigma_Y.$$
(B.15)

Le signe « - » de la partie droite indique une évolution de la compression, ou une décharge d'un état de tension de la contrainte. La valeur de $\overline{\sigma}_{11}$ pour laquelle l'une des phases atteint la plasticité, notée par $\overline{\sigma}^{(-)}$, est donnée par :

$$\overline{\sigma}^{(-)} = \max_{(i)} \left(\frac{C_{1111}^{(i)}}{C_{1111}^{(i)} - C_{1122}^{(i)}} \left[-\sigma_Y^{(i)} - \left(\frac{(C_{1122}^{(i)})^2}{C_{1111}^{(i)}} - \frac{C_{2222}^{(i)} + C_{2233}^{(i)}}{2} \right) \varepsilon_{p,11}^{(i)} \right] \right).$$
(B.16)

L'évolution reste élastique tant que $\overline{\sigma}_{11} \ge \overline{\sigma}^{(-)}$, ce qui se traduit par la condition suivante sur $\overline{\sigma}_{11} - \overline{\sigma}_{22}$:

$$\overline{\sigma}_{11} - \overline{\sigma}_{22} \ge \left(1 - \frac{\widetilde{C}_{1122}}{\widetilde{C}_{1111}}\right) \overline{\sigma}^{(-)} + \widetilde{\varepsilon}_{p,22} \left(\widetilde{C}_{2222} + \widetilde{C}_{2233} - \frac{2\widetilde{C}_{1122}^2}{\widetilde{C}_{1111}}\right).$$
(B.17)

B.2.2 Toutes les phases plastifient

Nous commençons de nouveau par calculer les expressions des coefficients $\beta^{(i)}$, utilisées cette fois dans l'équation (3.41). Les développements sont similaires au cas précédent, mais ici tous les incréments $\dot{\varepsilon}_{p,11}^{(i)}$ sont non nuls. Puisque les deux phases sont plastiques, l'expression de $\beta^{(2)}$ peut être obtenue à partie de $\beta^{(1)}$ en échangeant les indices. Commençons par exprimer $\dot{\varepsilon}_{11}^{(2)}$ comme une fonction de $\dot{\varepsilon}_{11}^{(1)}$:

$$\dot{\varepsilon}_{11}^{(2)} = \frac{C_{1111}^{(1)} + \left(C_{1122}^{(1)} - C_{1111}^{(1)}\right)\alpha^{(1)}}{C_{1111}^{(2)} + \left(C_{1122}^{(2)} - C_{1111}^{(2)}\right)\alpha^{(2)}}\dot{\varepsilon}_{11}^{(1)}.$$
(B.18)

Cela mène à l'expression de $\beta^{(1)}$:

$$\dot{\varepsilon}_{11}^{(1)} = \left(f_1 + f_2 \frac{C_{1111}^{(1)} + \left(C_{1122}^{(1)} - C_{1111}^{(1)}\right)\alpha^{(1)}}{C_{1111}^{(2)} + \left(C_{1122}^{(2)} - C_{1111}^{(2)}\right)\alpha^{(2)}} \right)^{-1} \dot{\varepsilon}_{11} = \beta^{(1)} \dot{\varepsilon}_{11}$$
(B.19)

Nous calculons ensuite la valeur de $|\overline{\sigma}_{11} - \overline{\sigma}_{22}|$ lorsque toutes les phases ont atteint la plasticité (ici, la valeur absolue est utile puisque les développements sont valables que l'échantillon soit dans un état de contrainte de compression ou de traction). Avec l'équation (3.32) et l'expression de $\tilde{\varepsilon}_{p,22}$ donnée dans (3.33), $|\overline{\sigma}_{11} - \overline{\sigma}_{22}|$ est donné par :

$$\left|\overline{\sigma}_{11} - \overline{\sigma}_{22}\right| = \left| \left(1 - \frac{\widetilde{C}_{1122}}{\widetilde{C}_{1111}} \right) \overline{\sigma}_{11} - \widetilde{C}_{1122} M_2 \right|.$$
(B.20)

Posons $\hat{\sigma}$ la valeur de contrainte axiale σ_{11} telle que toutes les phases aient atteint la plasticité. La valeur de la déformation plastique locale induite par une telle contrainte axiale peut être déduite du critère de plasticité locale (B.12) dans chaque phase :

$$\hat{\varepsilon}_p = \frac{2C_{1111}}{2(C_{1122})^2 - C_{1111}(C_{2222} + C_{2233}} \left(\pm \sigma_Y - \left(1 - \frac{C_{1122}}{C_{1111}}\right) \hat{\overline{\sigma}} \right).$$
(B.21)

Le symbole \pm indique le fait que nous ne fassions pas de distinction sur le fait que les deux phases atteignent la plasticité pour un état de contrainte de compression ou de tension. En utilisant maintenant l'Equation (3.31), la valeur de M_2 peut être calculée :

$$M_2 = \frac{1}{\tilde{C}_{1122}} \left[f_1 \left(\left(1 - \frac{C_{1122}^{(1)}}{C_{1111}^{(1)}} \right) \hat{\overline{\sigma}} - \left(\pm \sigma_Y^{(1)} \right) \right) + f_2 \left(\left(1 - \frac{C_{1122}^{(2)}}{C_{1111}^{(2)}} \right) \hat{\overline{\sigma}} - \left(\pm \sigma_Y^{(2)} \right) \right) \right].$$
(B.22)

L'Equation (B.20) devient :

$$\left|\overline{\sigma}_{11} - \overline{\sigma}_{22}\right| = \left|\widehat{\sigma}\left(1 - \frac{\widetilde{C}_{1122}}{\widetilde{C}_{1111}} - f_1\left(1 - \frac{C_{1122}^{(1)}}{C_{1111}^{(1)}}\right) - f_2\left(1 - \frac{C_{1122}^{(2)}}{C_{1111}^{(2)}}\right)\right) + f_1\left(\pm\sigma_Y^{(1)}\right) + f_2\left(\pm\sigma_Y^{(2)}\right)\right|.$$
(B.23)

D'après la définition de \tilde{C}_{1111} et \tilde{C}_{1122} , nous obtenons

$$\frac{\tilde{C}_{1122}}{\tilde{C}_{1111}} = \left\langle \frac{C_{1122}}{C_{1111}} \right\rangle,\tag{B.24}$$

et, en tirant avantage de la relation $f_1 + f_2 = 1$, il est trivial de déterminer que

$$1 - \frac{\widetilde{C}_{1122}}{\widetilde{C}_{1111}} - f_1 \left(1 - \frac{C_{1122}^{(1)}}{C_{1111}^{(1)}} \right) - f_2 \left(1 - \frac{C_{1122}^{(2)}}{C_{1111}^{(2)}} \right) = 0.$$
(B.25)

La condition sur la contrainte macroscopique est donc donnée par :

$$\left|\overline{\sigma}_{11} - \overline{\sigma}_{22}\right| = \left|f_1\left(\pm\sigma_Y^{(1)}\right) + f_2\left(\pm\sigma_Y^{(2)}\right)\right| = \left\langle\sigma_Y\right\rangle. \tag{B.26}$$

Cette condition implique que la contrainte macroscopique équivalente est égale à la limite d'élasticité moyenne lorsque toutes les phases ont atteint la plasticité.

B.2. MODÈLE PLASTIQUE EFFECTIF
Annexe C

Validation du calcul des contraintes résiduelles : application au cas d'une inclusion thermo-élastique

Nous cherchons dans cette annexe à évaluer le calcul des contraintes résiduelles, induites par une distribution de déformations libres, développé dans le Chapitre 4 (voir Section 4.4), en appliquant la méthodes des différences finies (DF). Pour cela, nous considérerons le cas d'une inclusion thermoélastique plongée dans une matrice élastique. Les calculs seront comparés avec la solution donnée par le logiciel Eléments Finis (EF) ABAQUS, qui fera office de solution de référence.

C.1 Description du problème

Le problème considéré dans cette annexe sera celui d'une inclusion circulaire portant des déformations libres uniformes de type thermique, plongée dans une matrice élastique. Ce problème est illustré sur la Figure C.1.



FIGURE C.1 – Illustration du problème de l'inclusion thermo-élastique

Les équations à résoudre sont rappelées dans la Section 4.4. Nous détaillerons ici les conditions de chargement et les conditions aux limites :

$$\begin{cases} T = T_1 & \text{dans } \Omega_{\text{incl}} \\ T = T_0 & \text{dans } \Omega_{\text{matrix}} \\ \boldsymbol{\sigma}.\boldsymbol{n} = 0 & \text{sur } \partial \Omega \\ \boldsymbol{u} = \boldsymbol{0} & \text{sur } A \text{ et } B. \end{cases}$$
(C.1)

où T est la température, σ le tenseur des contraintes, n la normale à la surface considérée et u le champ de déplacement. Les matériaux de la matrice et de l'inclusion seront supposés identiques, homogènes et isotropes, définis par une matrice de rigidité \mathbb{C} et un coefficient de dilatation thermique α . La déformation libre de nature thermique est définie de la manière suivante :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\rm th} = \alpha \left(T - T_0 \right) \boldsymbol{I},\tag{C.2}$$

avec I le tenseur identité d'ordre 2. Dans ces conditions, seule l'inclusion porte des déformations thermiques uniformes. Ces déformations en elles-mêmes ne sont pas suffisantes pour créer des contraintes résiduelles. Cependant, elles créent une incompatibilité de déformation, l'inclusion ne pouvant pas se déformer librement à cause de la matrice dans laquelle elle est plongée. Des déformations élastiques sont alors générées afin d'assurer la continuité du déplacement à l'interface matrice/inclusion, générant alors des contraintes résiduelles.

Pour notre application, nous considérerons le matériau utilisé par Anglin et al. [9] : E = 65.4 GPa, $\nu = 0.42$ et $\alpha = 15e^{-6}$ K⁻¹. La température imposée dans l'inclusion T_1 vaut 1273 K, résultant en une déformation thermique de 0.015 portée par l'identité. Nous présentons maintenant les paramètres et résultats des simulations.

C.2 Résultats des simulations

les dimensions du domaine choisies sont $L_x = L_y = 1$ mm, le rayon de l'inclusion est $r = 41.2 \ \mu$ m. L'inclusion représente donc 0.55 % de la surface totale, de sorte à éviter les effets de bords.

Paramètres des simulations ABAQUS Pour le calcul ABAQUS, 246 353 éléments quadrilatéraux CPE4 sont utilisés. Le maillage de l'inclusion est illustré dans la Figure C.2.



FIGURE C.2 – Illustration du maillage au niveau de l'inclusion dans le logiciel ABAQUS

Paramètres de la résolution par différences finies Pour la résolution par différences finies, une grille de 600×600 nœuds est utilisée.

Afin d'illustrer la performances générale des deux solutions, nous présentons les cartographies des amplitudes de déplacement sur la Figure C.3.



FIGURE C.3 – Cartographies des amplitudes de déplacement (en mm). (a) Solution EF. (b) Solution DF. (c) Logarithme décimal de l'erreur relative entre les solutions EF et DF.

La Figure C.3 montre que les solutions données par ABAQUS et les différences finies sont très proches. La Figure C.3(c) présente la cartographie du logarithme décimal des erreurs. Cette dernière présente une valeur maximale au niveau des conditions aux limites des points A et B du schéma de la Figure C.1, pour des valeurs de l'ordre de 90%. La valeur maximale de l'erreur relative dans l'inclusion est de 12%, en son centre. Nous pouvons également comparer les valeurs des déformations totales pour des lignes horizontales et verticales passant par le centre de l'inclusion (voir Figure C.4).



FIGURE C.4 – Distribution des composantes de déformation totale selon les solutions EF ou DF. (a) Distribution sur l'axe y. (b) Distribution sur l'axe x.

Les distributions de composantes de déformation totale présentées sur la Figure C.4 sont quasiidentiques entre les solutions différences finies et éléments finis. Des écarts sont observés au niveau de l'interface entre l'inclusion et la matrice. A titre d'exemple, le maximum de l'erreur relative sur la composante ε_{yy} sur l'axe y (voir Figure C.4(a)) est de 12%. Nous pouvons procéder à la même analyse pour les composantes de contraintes, qui sont présentées dans la Figure C.5.



FIGURE C.5 – Distribution des composantes de contraintes selon les solutions EF ou DF. (a) Distribution sur l'axe y. (b) Distribution sur l'axe x.

Concernant les composantes de contraintes, la comparaison est excellente partout sauf sur l'interface entre l'inclusion et la matrice, où de forts écarts sont observés. Par exemple, l'erreur relative maximale sur la composante σ_{yy} tracées sur l'axe y (Figure C.5(a)) est de 166.6%. Compte tenu du fait que de tels écart sont peu présents au niveau des déplacements et des déformations totales (directement calculées à partir du champ de déplacements), nous en concluons que la méthodes des différences finies parvient correctement à calculer le champ de déplacement comparé à la solution éléments finis. En revanche, une erreur est introduite lors du calcul des contraintes, lorsque les déformations élastiques sont reconstituées. Une telle erreur n'est présente que sur les interfaces. Cet aspect est donc à prendre en compte lors du calcul de contraintes résiduelles pour des distributions des déformations libres et/ou des propriétés mécaniques présentant des sauts. Anglin et al. [9] reportent également de tels écart sur les distributions de contraintes, pour un calcul 3D en FFT (Fast Fourrier Transform) comparé à la solution analytique donnée par Mura [135]. Selon les auteurs, ces écarts sont dus à des « dangling voxels », des voxels appartenant à l'inclusion mais n'ayant qu'un seul autre voxel en commun avec l'inclusion. Les auteurs parviennent à améliorer leurs résultats en imposant une condition plus stricte sur l'appartenance d'un voxel à l'inclusion (distance au centre de l'inclusion strictement inférieure au rayon au lieu d'inférieure ou égale). Cependant, une telle modification dans notre cas ne cause aucun changement des résultats. Il est donc fortement possible que la différence de méthode numérique soit la cause principale des écarts observés dans cette annexe.

Bibliographie

- Achintha, M., Nowell, D., 2011. Eigenstrain modelling of residual stresses generated by laser shock peening. Journal of Materials Processing Technology 211, 1091–1101.
- [2] Achintha, M., Nowell, D., Shapiro, K., Withers, P., 2013. Eigenstrain modelling of residual stress generated by arrays of laser shock peening shots and determination of the complete stress field using limited strain measurements. Surface and Coatings Technology 216, 68–77.
- [3] Adu-Gyamfi, S., Ren, X., Larson, E.A., Ren, Y., Tong, Z., 2018. The effects of laser shock peening scanning patterns on residual stress distribution and fatigue life of AA2024 aluminium alloy. Optics & Laser Technology 108, 177–185.
- [4] Agrawal, V., Bhattacharya, K., 2014. Shock wave propagation through a model one dimensional heterogeneous medium. International Journal of Solids and Structures 51, 3604–3618.
- [5] Ahdad, F., Desvignes, M., 1996. Contraintes résiduelles et déformations plastiques : Leurs relations mutuelles pour des pièces de géométrie simple. Matériaux & Techniques 84, 46–50.
- [6] Amar, H., Vignal, V., Krawiec, H., Josse, C., Peyre, P., da Silva, S., Dick, L., 2011. Influence of the microstructure and laser shock processing (LSP) on the corrosion behaviour of the AA2050-T8 aluminium alloy. Corrosion Science 53, 3215–3221.
- [7] Amarchinta, H.K., Grandhi, R.V., Clauer, A.H., Langer, K., Stargel, D.S., 2010. Simulation of residual stress induced by a laser peening process through inverse optimization of material models. Journal of Materials Processing Technology 210, 1997–2006.
- [8] Amarchinta, H.K., Grandhi, R.V., Langer, K., Stargel, D.S., 2009. Material model validation for laser shock peening process simulation. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 17, 015010.
- [9] Anglin, B., Lebensohn, R., Rollett, A., 2014. Validation of a numerical method based on Fast Fourier Transforms for heterogeneous thermoelastic materials by comparison with analytical solutions. Computational Materials Science 87, 209–217.
- [10] Arminjon, M., 1991. A regular Form of the Schmid Law. Application to the Ambiguity Problem. Textures et Microstructures 14-18, 1121–1128.
- [11] Asaro, R., Needleman, A., 1985. Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals. Acta Metallurgica 33, 923–953.

- [12] Atkinson, R.J., Winkworth, W.J., Norris, G.M., 1960. Behaviour of Skin Fatigue Cracks at the Corners of Windows in a Comet I Fuselage. Reports and Memoranda, 38.
- [13] Ayad, M., Karathanasopoulos, N., Reda, H., Ganghoffer, J., Lakiss, H., 2020. On the role of second gradient constitutive parameters in the static and dynamic analysis of heterogeneous media with micro-inertia effects. International Journal of Solids and Structures 190, 58–75.
- [14] Ayad, M., Lapostolle, L., Rondepierre, A., Bras, C.L., Ünaldi, S., Donik, C., Klobčar, D., Berthe, L., Trdan, U., 2022a. New methodology of dynamical material response of dissimilar FSWed Al alloy joint under high strain rate laser shock loading. Materials & Design, 111080.
- [15] Ayad, M., Lapostolle, L., Rondepierre, A., Le Bras, C., Scius-Bertrand, M., Ünaldi, S., Trdan, U., Rouchausse, Y., Grassy, J., Maillot, T., Lapoujade, V., Michel, C., Berthe, L., 2022b. Modeling of multi-edge effects in the case of laser shock loadings applied on thin foils : Application for material characterization of aluminum alloys. Journal of Applied Physics 131, 095902.
- [16] Badreddine, J., Rouhaud, E., Micoulaut, M., Remy, S., 2014. Simulation of shot dynamics for ultrasonic shot peening : Effects of process parameters. International Journal of Mechanical Sciences 82, 179–190.
- [17] Balasubramanian, S., Anand, L., 2002. Elasto-viscoplastic constitutive equations for polycrystalline fcc materials at low homologous temperatures. Journal of the Mechanics and Physics of Solids 50, 101–126.
- [18] Ballard, P., 1991. Contraintes résiduelles induites par impact rapide. Application au choc laser. PhD Thesis. Ecole Polytechnique.
- [19] Banaś, G., Elsayed-Ali, H.E., Lawrence, F.V., Rigsbee, J.M., 1990. Laser shock-induced mechanical and microstructural modification of welded maraging steel. Journal of Applied Physics 67, 2380–2384.
- [20] Bellis, C., Lombard, B., Touboul, M., Assier, R., 2021. Effective dynamics for low-amplitude transient elastic waves in a 1D periodic array of non-linear interfaces. Journal of the Mechanics and Physics of Solids 149, 104321.
- [21] Benxin, W., Sha, T., Shuting, L., 2010. Numerical Investigation of Opposing Dual Sided Microscale Laser Shock Peening. Journal of Manufacturing Science and Engineering 256, 4376–4382.
- [22] Berezovski, A., Berezovski, M., Engelbrecht, J., 2006. Numerical simulation of nonlinear elastic wave propagation in piecewise homogeneous media. Materials Science and Engineering A , 364– 369.
- [23] Bhamare, S., Ramakrishnan, G., Mannava, S.R., Langer, K., Vasudevan, V.K., Qian, D., 2013. Simulation-based optimization of laser shock peening process for improved bending fatigue life of Ti-6Al-2Sn-4Zr-2Mo alloy. Surface and Coatings Technology 232, 464–474.
- [24] Bishop, J.F.W., Hill, R., 1951. CXXVIII. A theoretical derivation of the plastic properties of a polycrystalline face-centred metal. Philosophical Magazine, 11.

- [25] Blackman, D., Boyce, D., Castelnau, O., Dawson, P., Laske, G., 2017. Effects of crystal preferred orientation on upper-mantle flow near plate boundaries : rheologic feedbacks and seismic anisotropy. Geophysical Journal International 210, 1481–1493.
- [26] Bonnet, M., Frangi, A., 2007. Analyse des solides déformables par la méthode des éléments finis. Les éditions de l'école polytechnique edition.
- [27] Boots, B., Murdoch, D., 1983. The spatial arrangement of random Voronoi polygons. Computers & Geosciences 9, 351–365.
- [28] Braisted, W., 1999. Finite element simulation of laser shock peening. International Journal of Fatigue 21, 719–724.
- [29] le Bras, C., 2022. Etude de matériaux polymères comme confineurs solides dans l'application choc laser LSP. PhD Thesis. Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers.
- [30] Brenner, R., Lebensohn, R., Castelnau, O., 2009. Elastic anisotropy and yield surface estimates of polycrystals. International Journal of Solids and Structures 46, 3018–3026.
- [31] Breumier, S., 2021. Methodology for shot-peening induced intragranular residual stress prediction. PhD Thesis. Ecole des Mine de Saint-Etienne.
- [32] Breumier, S., Villani, A., Maurice, C., Lévesque, M., Kermouche, G., 2019. Effect of crystal orientation on indentation-induced residual stress field : Simulation and experimental validation. Materials & Design 169, 107659.
- [33] Brighi, B., Chipot, M., Gut, E., 1998. Finite differences on triangular grids. Numerical Methods for Partial Differential Equations 14, 567–579.
- [34] Brockman, R.A., Braisted, W.R., Olson, S.E., Tenaglia, R.D., Clauer, A.H., Langer, K., Shepard, M.J., 2012. Prediction and characterization of residual stresses from laser shock peening. International Journal of Fatigue 36, 96–108.
- [35] Broggiato, G.B., Campana, F., Cortese, L., 2008. The Chaboche nonlinear kinematic hardening model : calibration methodology and validation. Meccanica 43, 115–124.
- [36] Bronkhorst, C., Hansen, B., Cerreta, E., Bingert, J., 2007. Modeling the microstructural evolution of metallic polycrystalline materials under localization conditions. Journal of the Mechanics and Physics of Solids 55, 2351–2383.
- [37] Bunge, H.J., 1982. Texture analysis in materials science : mathematical methods. Butterworths, London; Boston. english ed edition.
- [38] Busso, E.P., 1990. Cyclic Deformation of Monocrystalline Nickel Aluminide and High Temperature Coatings. PhD Thesis. Massachussets Insitute of Technology. USA.
- [39] Cao, Z.w., Che, Z.g., Zou, S.k., Fei, Q.x., 2011. Numerical simulation of residual stress field induced by laser shock processing with square spot. Journal of Shanghai University (English Edition) 15, 553–556.

- [40] Capdeville, Y., Guillot, L., Marigo, J.J., 2010. 1-D non-periodic homogenization for the seismic wave equation. Geophysical Journal International, 897–910.
- [41] Capdeville, Y., Marigo, J.J., 2007. Second order homogenization of the elastic wave equation for non-periodic layered media. Geophysical Journal International 170, 823–838.
- [42] Castelnau, O., Francillette, H., Bacroix, B., Lebensohn, R., 2001. Texture dependent plastic behavior of Zr 702 at large strain. Journal of Nuclear Materials 297, 14–26.
- [43] Cellard, C., Retraint, D., François, M., Rouhaud, E., Le Saunier, D., 2012. Laser shock peening of Ti-17 titanium alloy : Influence of process parameters. Materials Science and Engineering : A 532, 362–372.
- [44] Chaieb, I., 2004. Analyse et simulation des contraintes résiduelles induites par des traitements mécaniques de précontrainte en grenaillage et choc laser. PhD Thesis. Université de Reims Champagne-Ardenne.
- [45] Chatzigeorgiou, G., Charalambakis, N., Murat, F., 2009. Homogenization of a pressurized tube made of elastoplastic materials with discontinuous properties. International Journal of Solids and Structures 46, 3902–3913.
- [46] Chen, H., Kysar, J.W., Yao, Y.L., 2004a. Characterization of Plastic Deformation Induced by Microscale Laser Shock Peening. Journal of Applied Mechanics 71, 713–723.
- [47] Chen, X., Chandra, N., 2004. The effect of heterogeneity on plane wave propagation through layered composites. Composites Science and Technology 64, 1477–1493.
- [48] Chen, X., Chandra, N., Rajendran, A., 2004b. Analytical solution to the plate impact problem of layered heterogeneous material systems. International Journal of Solids and Structures 41, 4635–4659.
- [49] Chu, J., Rigsbee, J., Banaś, G., Elsayed-Ali, H., 1999. Laser-shock processing effects on surface microstructure and mechanical properties of low carbon steel. Materials Science and Engineering: A 260, 260–268.
- [50] Clauer, A.H., 2019. Laser Shock Peening, the Path to Production. Metals 9, 626.
- [51] Clauer, A.H., Lahrman, D.F., 2000. Laser Shock Peening for Fatigue Resistance, in : Materials : Book of Abstracts, American Society of Mechanical Engineers, Orlando, Florida, USA. pp. 75– 75.
- [52] Cochennec, F., 2009. Simulation numérique du grenaillage de mise en forme pour une intégration produit-procédés en conception mécanique. PhD Thesis. Université de Technologie de Troyes.
- [53] Correa, C., Ruiz de Lara, L., Díaz, M., Gil-Santos, A., Porro, J., Ocaña, J., 2015. Effect of advancing direction on fatigue life of 316L stainless steel specimens treated by double-sided laser shock peening. International Journal of Fatigue 79, 1–9.
- [54] Couque, H., Boulanger, R., Bornet, F., 2006. A modified Johnson-Cook model for strain rates ranging from 10⁻³⁵⁻¹\$. Journal de Physique IV (Proceedings) 134, 87–93.

- [55] Cuenca, E., Ducousso, M., Rondepierre, A., Videau, L., Cuvillier, N., Berthe, L., Coulouvrat, F., 2020. Propagation of laser-generated shock waves in metals : 3D axisymmetric simulations compared to experiments. Journal of Applied Physics 128, 244903.
- [56] Darrieulat, M., Piot, D., 1996. A method of generating analytical yield surfaces of crystalline materials. International Journal of Plasticity 12, 575–610.
- [57] Davis, T.A., Gilbert, J.R., Larimore, S.I., Ng, E.G., 2004. Algorithm 836 : COLAMD, a column approximate minimum degree ordering algorithm. ACM Transactions on Mathematical Software 30, 377–380.
- [58] Ding, K., 2003. Three-dimensional Dynamic Finite Element Analysis of Multiple Laser Shock Peening Processes. Surface Engineering 19, 351–358.
- [59] Ding, K., Ye, L., 2006a. Laser Shock Peening Performance and process simulation. Woodhead Publishing Limited.
- [60] Ding, K., Ye, L., 2006b. Physical and mechanical mechanisms of laser shock peening, in : Laser Shock Peening. Elsevier, pp. 7–46.
- [61] Ding, K., Ye, L., 2006c. Simulation of multiple laser shock peening of a 35CD4 steel alloy. Journal of Materials Processing Technology 178, 162–169.
- [62] Ducousso, M., Reverdy, F., 2020. Real-time imaging of microcracks on metallic surface using total focusing method and plane wave imaging with Rayleigh waves. NDT & E International 116, 102311.
- [63] Eghtesad, A., Barrett, T.J., Knezevic, M., 2018. Compact reconstruction of orientation distributions using generalized spherical harmonics to advance large-scale crystal plasticity modeling : Verification using cubic, hexagonal, and orthorhombic polycrystals. Acta Materialia 155, 418– 432.
- [64] Fabbro, R., Fournier, J., Ballard, P., Devaux, D., Virmont, J., 1990. Physical study of laserproduced plasma in confined geometry. Journal of Applied Physics 68, 775–784.
- [65] Fan, Y., Wang, Y., Vukelic, S., Yao, Y.L., 2007. Numerical Investigation of Opposing Dual Sided Microscale Laser Shock Peening. Journal of Manufacturing Science and Engineering 129, 256–264.
- [66] Ferenc, J.S., Néda, Z., 2007. On the size distribution of Poisson Voronoi cells. Physica A : Statistical Mechanics and its Applications 385, 518–526.
- [67] Follansbee, P., Kocks, U., 1988. A constitutive description of the deformation of copper based on the use of the mechanical threshold stress as an internal state variable. Acta Metallurgica 36, 81–93.
- [68] Forest, S., Rubin, M., 2016. A rate-independent crystal plasticity model with a smooth elastic-plastic transition and no slip indeterminacy. European Journal of Mechanics - A/Solids 55, 278–288.

- [69] Fox, J.A., 1974. Effect of water and paint coatings on laser-irradiated targets. Applied Physics Letters 24, 461–464.
- [70] Franciosi, P., 1983. Glide mechanisms in b.c.c. crystals : An investigation of the case of alphairon through multislip and latent hardening tests. Acta Metallurgica 31, 1331–1342.
- [71] Franciosi, P., 1985. The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals. Acta Metallurgica 33, 1601–1612.
- [72] Franciosi, P., Berveiller, M., Zaoui, A., 1980. Latent hardening in copper and aluminium single crystals. Acta Metallurgica 28, 273–283.
- [73] Gallitelli, D., Boyer, V., Gelineau, M., Colaitis, Y., Rouhaud, E., Retraint, D., Kubler, R., Desvignes, M., Barrallier, L., 2016. Simulation of shot peening : From process parameters to residual stress fields in a structure. Comptes Rendus Mécanique 344, 355–374.
- [74] Ge, M.Z., Xiang, J.Y., 2016. Effect of laser shock peening on microstructure and fatigue crack growth rate of AZ31B magnesium alloy. Journal of Alloys and Compounds 680, 544–552.
- [75] Ge, M.Z., Xiang, J.Y., Fan, Z., Lu, Y., Lei, W., 2018. Effect of laser energy on microstructure of Mg-3Al-1Zn alloy treated by LSP. Journal of Alloys and Compounds 734, 266–274.
- [76] Gelineau, M., 2018. Etude de l'impact du grenaillage sur des composants mécaniques industriels à géométrie complexe. PhD Thesis. Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers.
- [77] Gill, A.S., Telang, A., Vasudevan, V.K., 2015. Characteristics of surface layers formed on inconel 718 by laser shock peening with and without a protective coating. Journal of Materials Processing Technology 225, 463–472.
- [78] Glynn, J., 1844. On the causes of fracture of the Axles of Railway Carriages. Minutes of the Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, 202–203.
- [79] Granados-Alejo, V., Rubio-González, C., Vázquez-Jiménez, C., Banderas, J., Gómez-Rosas, G., 2018. Influence of specimen thickness on the fatigue behavior of notched steel plates subjected to laser shock peening. Optics & Laser Technology 101, 531–544.
- [80] Gu, T., Medy, J.R., Klosek, V., Castelnau, O., Forest, S., Hervé-Luanco, E., Lecouturier–Dupouy, F., Proudhon, H., Renault, P.O., Thilly, L., Villechaise, P., 2019. Multiscale modeling of the elasto-plastic behavior of architectured and nanostructured Cu-Nb composite wires and comparison with neutron diffraction experiments. International Journal of Plasticity 122, 1–30.
- [81] Gurrutxaga-Lerma, B., Balint, D.S., Dini, D., Eakins, D.E., Sutton, A.P., 2013. A dynamic discrete dislocation plasticity method for the simulation of plastic relaxation under shock loading. Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences 469, 20130141.
- [82] Harewood, F., McHugh, P., 2007. Comparison of the implicit and explicit finite element methods using crystal plasticity. Computational Materials Science 39, 481–494.
- [83] He, Q.C., Feng, Z.Q., 2012. Homogenization of layered elastoplastic composites : Theoretical results. International Journal of Non-Linear Mechanics 47, 367–376.

- [84] Heuzé, T., 2017. Lax–Wendroff and TVD finite volume methods for unidimensional thermomechanical numerical simulations of impacts on elastic–plastic solids. Journal of Computational Physics 346, 369–388.
- [85] Heuzé, T., 2019. Lax-Wendroff schemes for elastic-plastic solids. Journal of Computational Physics 396, 89–105.
- [86] Hfaiedh, N., Peyre, P., Song, H., Popa, I., Ji, V., Vignal, V., 2015. Finite element analysis of laser shock peening of 2050-T8 aluminum alloy. International Journal of Fatigue 70, 480–489.
- [87] Hu, Y., Yao, Z., 2008a. Numerical simulation and experimentation of overlapping laser shock processing with symmetry cell. International Journal of Machine Tools and Manufacture 48, 152–162.
- [88] Hu, Y., Yao, Z., 2008b. Overlapping rate effect on laser shock processing of 1045 steel by small spots with Nd :YAG pulsed laser. Surface and Coatings Technology 202, 1517–1525.
- [89] Huang, Y., 1991. A User-Material Subroutine Incorporating Single Crystal Plasticity in the ABAQUS Finite Element Program. Mech. Report., 47.
- [90] Hutchinson, J.W., 1976. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences 348, 101–127.
- [91] Jeanson, A.C., Bay, F., Jacques, N., Avrillaud, G., Arrigoni, M., Mazars, G., 2016. A coupled experimental/numerical approach for the characterization of material behaviour at high strainrate using electromagnetic tube expansion testing. International Journal of Impact Engineering 98, 75–87.
- [92] Johns, D.J., 1965. Thermal Stress Analyses. Pergamon press edition.
- [93] Johnson, G.R., Cook, W.H., 1983. A constitutive model and data for metals subjected to large strains, high strain rates and high temperatures. In Proceedings 7th International Symposium on Ballistics, 541–547.
- [94] Johnson, J.N., 1972. Calculation of Plane-Wave Propagation in Anisotropic Elastic-Plastic Solids. Journal of Applied Physics 43, 2074–2082.
- [95] Julan, E., 2015. Simulation numérique du choc laser pour la mise en compression en présence de l'état initial dû au soudage. PhD Thesis. Ecole Polytechnique.
- [96] Julan, E., Stolz, C., Tahéri, S., Peyre, P., Gilles, P., 2013. Simulation of laser peening for generation of a surface compressive stresses. 21e Congrès Français de Mécanique, 6.
- [97] Kanel, G.I., Garkushin, G.V., Savinykh, A.S., Razorenov, S.V., de Resseguier, T., Proud, W.G., Tyutin, M.R., 2014. Shock response of magnesium single crystals at normal and elevated temperatures. Journal of Applied Physics 116, 143504.
- [98] Kang, W., Cho, S., Huh, H., Chung, D., 1999. Modified Johnson-Cook model for vehicle body crashworthiness simulation. International Journal of Vehicle Design 21, 424.

- [99] Kanit, T., Forest, S., Galliet, I., Mounoury, V., Jeulin, D., 2003. Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. International Journal of Solids and Structures 40, 3647–3679.
- [100] Keller, S., Horstmann, M., Kashaev, N., Klusemann, B., 2019. Experimentally validated multistep simulation strategy to predict the fatigue crack propagation rate in residual stress fields after laser shock peening. International Journal of Fatigue 124, 265–276.
- [101] Khan, A.S., Liang, R., 1999. Behaviors of three BCC metal over a wide range of strain rates and temperatures : experiments and modeling. International Journal of Plasticity 15, 1089–1109.
- [102] Khan, A.S., Liu, J., Yoon, J.W., Nambori, R., 2015. Strain rate effect of high purity aluminum single crystals : Experiments and simulations. International Journal of Plasticity 67, 39–52.
- [103] Khan, A.S., Sung Suh, Y., Kazmi, R., 2004. Quasi-static and dynamic loading responses and constitutive modeling of titanium alloys. International Journal of Plasticity 20, 2233–2248.
- [104] Kim, J.H., Kim, Y.J., Lee, J.W., Yoo, S.H., 2014. Study on effect of time parameters of laser shock peening on residual stresses using FE simulation. Journal of Mechanical Science and Technology 28, 1803–1810.
- [105] Kim, J.S., Nam, H.S., Kim, Y.J., Kim, J.H., 2017. Numerical Study of Laser Shock Peening Effects on Alloy 600 Nozzles With Initial Residual Stresses. Journal of Pressure Vessel Technology 139, 041406.
- [106] Korsunsky, A.M., 2005. The modelling of residual stresses due to surface peening using eigenstrain distributions. The Journal of Strain Analysis for Engineering Design 40, 817–824.
- [107] Kubler, R., Berveiller, S., Bouscaud, D., Guiheux, R., Patoor, E., Puydt, Q., 2019. Shot peening of TRIP780 steel : Experimental analysis and numerical simulation. Journal of Materials Processing Technology 270, 182–194.
- [108] Kurganov, A., Noelle, S., Petrova, G., 2001. Semidiscrete Central-Upwind Schemes for Hyperbolic Conservation Laws and Hamilton–Jacobi Equations. SIAM Journal on Scientific Computing 23, 707–740.
- [109] Kurganov, A., Petrova, G., 2001. A third-order semi-discrete genuinely multidimensional central scheme for hyperbolic conservation laws and related problems :. Numerische Mathematik 88, 683–729.
- [110] Kurganov, A., Tadmor, E., 2000. New High-Resolution Central Schemes for Nonlinear Conservation Laws and Convection–Diffusion Equations. Journal of Computational Physics 160, 241–282.
- [111] La Cruz, W., Martínez, J.M., Raydan, M., 2006. Spectral residual method without gradient information for solving large-scale nonlinear systems of equations. Mathematics of Computation 75, 1429–1449.
- [112] Lapostolle, L., Derrien, K., Morin, L., Berthe, L., Castelnau, O., 2022. Modeling and simulation of laser shock waves in elasto-plastic 1D layered specimens. International Journal of Solids and Structures 239-240, 111422.

- [113] Larson, E.A., Ren, X., Adu-Gyamfi, S., Zhang, H., Ren, Y., 2019. Effects of scanning path gradient on the residual stress distribution and fatigue life of AA2024-T351 aluminium alloy induced by LSP. Results in Physics 13, 102123.
- [114] Le Bras, C., Rondepierre, A., Ayad, M., Rouchausse, Y., Gervais, M., Valadon, S., Berthe, L., 2021. Novel Confinement Possibility for Laser Shock : Use of Flexible Polymer Confinement at 1064 nm Wavelength. Metals 11, 1467.
- [115] Le Bras, C., Rondepierre, A., Seddik, R., Scius-Bertrand, M., Rouchausse, Y., Videau, L., Fayolle, B., Gervais, M., Morin, L., Valadon, S., Ecault, R., Furfari, D., Berthe, L., 2019. Laser Shock Peening : Toward the Use of Pliable Solid Polymers for Confinement. Metals 9, 793.
- [116] Lebensohn, R., Castelnau, O., Brenner, R., Gilormini, P., 2005. Study of the antiplane deformation of linear 2-D polycrystals with different microstructures. International Journal of Solids and Structures 42, 5441–5459.
- [117] Lemaître, J., Chaboche, J.L., 1990. Mechanics of solid materials. Cambridge University Press, Cambridge.
- [118] Leveque, R.J., 1997. Wave Propagation Algorithms for Multidimensional Hyperbolic Systems. Journal of Computational Physics 131, 327–353.
- [119] Leveque, R.J., 2002. Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems. Cambridge university press edition.
- [120] Liszka, T., Orkisz, J., 1980. The finite difference method at arbitrary irregular grids and its application in applied mechanics. Computers & Structures 11, 83–95.
- [121] Lloyd, J., Clayton, J., Becker, R., McDowell, D., 2014. Simulation of shock wave propagation in single crystal and polycrystalline aluminum. International Journal of Plasticity 60, 118–144.
- [122] Luscher, D.J., Bronkhorst, C.A., Alleman, C.N., Addessio, F.L., 2013. A model for finitedeformation nonlinear thermomechanical response of single crystal copper under shock conditions. Journal of the Mechanics and Physics of Solids 61, 1877–1894.
- [123] Mareau, C., Daymond, M.R., 2011. Comparison of experimentally determined texture development in Zircaloy-2 with predictions from a rate-dependent polycrystalline model. Materials Science and Engineering : A 528, 8676–8686.
- [124] Meyer, H.W., Kleponis, D.S., 2001. Modeling the high strain rate behavior of titanium undergoing ballistic impact and penetration. International Journal of Impact Engineering 26, 509–521.
- [125] Meyers, M.A., 1994. Dynamic behavior of materials. Wiley, New York.
- [126] Milani, A., Dabboussi, W., Nemes, J., Abeyaratne, R., 2009. An improved multi-objective identification of Johnson–Cook material parameters. International Journal of Impact Engineering 36, 294–302.
- [127] Milton, G.W., 2002. The Theory of Composites. Cambridge monographs on applied and computational mathematics edition.

- [128] Ming, L., Pantalé, O., 2018. An efficient and robust VUMAT implementation of elastoplastic constitutive laws in Abaqus/Explicit finite element code. Mechanics & Industry 19, 308.
- [129] Mirbagheri, Y., Nahvi, H., Parvizian, J., Düster, A., 2015. Reducing spurious oscillations in discontinuous wave propagation simulation using high-order finite elements. Computers & Mathematics with Applications 70, 1640–1658.
- [130] Moakher, M., Norris, A.N., 2006. The Closest Elastic Tensor of Arbitrary Symmetry to an Elasticity Tensor of Lower Symmetry. Journal of Elasticity 85, 215–263.
- [131] Molinari, A., Mercier, S., 2001. Micromechanical modelling of porous materials under dynamic loading. Journal of the Mechanics and Physics of Solids 49, 1497–1516.
- [132] Montross, C., Wei, T., Ye, L., Clark, G., Mai, Y.W., 2002. Laser shock processing and its effects on microstructure and properties of metal alloys : a review. International Journal of Fatigue 24, 1021–1036.
- [133] Morin, L., Braham, C., Tajdary, P., Seddik, R., Gonzalez, G., 2021. Reconstruction of heterogeneous surface residual-stresses in metallic materials from X-ray diffraction measurements. Mechanics of Materials 158, 103882.
- [134] Morin, L., Gilormini, P., Derrien, K., 2020. Generalized Euclidean Distances for Elasticity Tensors. Journal of Elasticity 138, 221–232.
- [135] Mura, T., 1987. Micromechanics of defects in solids. volume 3 of Mechanics of Elastic and Inelastic Solids. Springer Netherlands, Dordrecht.
- [136] Méric, L., Cailletaud, G., Gaspérini, M., 1994. F.E. calculations of copper bicrystal specimens submitted to tension-compression tests. Acta Metallurgica et Materialia 42, 921–935.
- [137] Møller, J., 1992. Random Johnson-Mehl tessellations. Advances in Applied Probability 24, 814– 844.
- [138] Nadgornyi, E., 1988. Dislocation dynamics and mechanical properties of crystals. Progress in Materials Science, 1–530.
- [139] Nemat-nasser, S., Okinaka, T., Nesterenko, V., Liu, M., 1998. Dynamic void collapse in crystals : Computational modelling and experiments. Philosophical Magazine A 78, 1151–1174.
- [140] Noh, G., Bathe, K.J., 2013. An explicit time integration scheme for the analysis of wave propagations. Computers & Structures 129, 178–193.
- [141] van Nuland, T., van Dommelen, J., Geers, M., 2021. An anisotropic Voronoi algorithm for generating polycrystalline microstructures with preferred growth directions. Computational Materials Science 186, 109947.
- [142] Nye, J.F., 1984. Physical properties of crystals : their representation by tensors and matrices. Clarendon Press; Oxford University Press, Oxford [Oxfordshire] : New York. 1st published in pbk. with corrections, 1984 edition.

- [143] Ocaña, J., Morales, M., Molpeceres, C., Torres, J., 2004. Numerical simulation of surface deformation and residual stresses fields in laser shock processing experiments. Applied Surface Science 238, 242–248.
- [144] Okabe, A., 2017. Spatial Tessellations, in : Richardson, D., Castree, N., Goodchild, M.F., Kobayashi, A., Liu, W., Marston, R.A. (Eds.), International Encyclopedia of Geography : People, the Earth, Environment and Technology. John Wiley & Sons, Ltd, Oxford, UK, pp. 1–11.
- [145] Opršal, I., Zahradník, J., 1999. Elastic finite-difference method for irregular grids. GEOPHYSICS 64, 240–250.
- [146] Park, K.C., Lim, S.J., Huh, H., 2011. An Explicit Integration Method for Analysis of Wave Propagation in Heterogeneous Materials, in : Volume 8 : Mechanics of Solids, Structures and Fluids; Vibration, Acoustics and Wave Propagation, ASMEDC, Denver, Colorado, USA. pp. 547–555.
- [147] Park, K.C., Lim, S.J., Huh, H., 2012. A method for computation of discontinuous wave propagation in heterogeneous solids : basic algorithm description and application to one-dimensional problems. International Journal for Numerical Methods in Engineering 91, 622–643.
- [148] Paul, S.K., Tarafder, S., 2013. Cyclic plastic deformation response at fatigue crack tips. International Journal of Pressure Vessels and Piping 101, 81–90.
- [149] Paux, J., 2017. Contribution à la modélisation micromécanique de la plasticité de matériaux cristallins poreux. PhD Thesis. Université Pierre et Marie Curie.
- [150] Peirce, D., Asaro, R., Needleman, A., 1983. Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids. Acta Metallurgica 31, 1951–1976.
- [151] Peyre, P., Berthe, L., Scherpereel, X., Fabbro, R., 1998. Laser-shock processing of aluminiumcoated 55C1 steel in water-confinement regime, characterization and application to high-cycle fatigue behaviour. Journal of Material Science, 1421–1429.
- [152] Peyre, P., Berthe, L., Vignal, V., Popa, I., Baudin, T., 2012. Analysis of laser shock waves and resulting surface deformations in an Al–Cu–Li aluminum alloy. Journal of Physics D : Applied Physics 45, 335304.
- [153] Peyre, P., Chaieb, I., Braham, C., 2007. FEM calculation of residual stresses induced by laser shock processing in stainless steels. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 15, 205–221.
- [154] Peyre, P., Fabbro, R., Merrien, P., Lieurade, H., 1996. Laser shock processing of aluminium alloys. Application to high cycle fatigue behaviour. Materials Science and Engineering : A 210, 102–113.
- [155] Peyre, P., Sollier, A., Chaieb, I., Berthe, L., Bartnicki, E., Braham, C., Fabbro, R., 2003. FEM simulation of residual stresses induced by laser Peening. The European Physical Journal Applied Physics 23, 83–88.
- [156] Postma, G.W., 1955. Wave propagation in a stratified medium. Geophysics 20, 27.

- [157] Powell, M.J.D., 1964. An efficient method for finding the minimum of a function of several variables without calculating derivatives. The Computer Journal 7, 155–162.
- [158] Preston, D.L., Tonks, D.L., Wallace, D.C., 2003. Model of plastic deformation for extreme loading conditions. Journal of Applied Physics 93, 211–220.
- [159] Quey, R., Dawson, P., Barbe, F., 2011. Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method : Generation, meshing and remeshing. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 200, 1729–1745.
- [160] Ren, X., Zhang, Y., Zhang, T., Jiang, D., Yongzhuo, H., Jiang, Y., Chen, K., 2011. Comparison of the simulation and experimental fatigue crack behaviors in the nanoseconds laser shocked aluminum alloy. Materials & Design 32, 1138–1143.
- [161] Rojas, D.F., Isiet, M., Ponga, M., 2022. Dynamic recrystallization in face-centered cubic particles during high-velocity impacts. Mechanics of Materials 168, 104268.
- [162] Rondepierre, A., 2022. Interaction laser/matière en régime confiné pour des petites taches focales (inférieures au mm). Application au renforcement de surfaces par grenaillage laser. PhD Thesis. Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers.
- [163] Rondepierre, A., Rouchausse, Y., Videau, L., Casagrande, O., Castelnau, O., Berthe, L., 2021a. Laser interaction in a water tank configuration : Higher confinement breakdown threshold and greater generated pressures for laser shock peening. Journal of Laser Applications 33, 042022.
- [164] Rondepierre, A., Unaldi, S., Rouchausse, Y., Videau, L., Fabbro, R., Casagrande, O., Simon-Boisson, C., Besaucéle, H., Castelnau, O., Berthe, L., 2021b. Beam size dependency of a laser-induced plasma in confined regime : Shortening of the plasma release. Influence on pressure and thermal loading. Optics & Laser Technology 135, 106689.
- [165] Rubio-González, C., Gomez-Rosas, G., Ocaña, J., Molpeceres, C., Banderas, A., Porro, J., Morales, M., 2006. Effect of an absorbent overlay on the residual stress field induced by laser shock processing on aluminum samples. Applied Surface Science 252, 6201–6205.
- [166] Rule, W.K., Jones, S., 1998. A Revised Form for the Johnson-Cook Strength Model. International Journal of Impact Engineering 21, 609–624.
- [167] Runnels, B., Agrawal, V., Zhang, W., Almgren, A., 2021. Massively parallel finite difference elasticity using block-structured adaptive mesh refinement with a geometric multigrid solver. Journal of Computational Physics 427, 110065.
- [168] Sano, Y., Mukai, N., Okazaki, K., Obata, M., 1997. Residual stress improvement in metal surface by underwater laser irradiation. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms 121, 432–436.
- [169] Schreiber, J., Smid, I., Eden, T., Koudela, K., Cote, D., Champagne, V., 2021. Cold spray particle impact simulation using the Preston-Tonks-Wallace plasticity model. Finite Elements in Analysis and Design 191, 103557.
- [170] Scius-Bertrand, M., 2021. Endommagements maitrisés par choc laser symétrique et désassemblage des collages. PhD Thesis. Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers.

- [171] Scius-Bertrand, M., Videau, L., Rondepierre, A., Lescoute, E., Rouchausse, Y., Kaufman, J., Rostohar, D., Brajer, J., Berthe, L., 2021. Laser induced plasma characterization in direct and water confined regimes : new advances in experimental studies and numerical modelling. Journal of Physics D : Applied Physics 54, 055204.
- [172] Seddik, R., Rondepierre, A., Prabhakaran, S., Morin, L., Favier, V., Palin-Luc, T., Berthe, L., 2022. Identification of constitutive equations at very high strain rates using shock wave produced by laser. European Journal of Mechanics - A/Solids 92, 104432.
- [173] Segurado, J., Lebensohn, R.A., 2021. An FFT-based approach for Bloch wave analysis : application to polycrystals. Computational Mechanics 68, 981–1001.
- [174] Serón, F.J., Sanz, F.J., Kindelán, M., Badal, J.I., 1990. Finite-element method for elastic wave propagation. Communications in Applied Numerical Methods 6, 359–368.
- [175] Shehadeh, M.A., Zbib, H.M., Diaz de la Rubia, T., 2005. Multiscale dislocation dynamics simulations of shock compression in copper single crystal. International Journal of Plasticity 21, 2369–2390.
- [176] Simo, J.C., Taylor, R.L., 1986. A return mapping algorithm for plane stress elastoplasticity. International Journal for Numerical Methods in Engineering 22, 649–670.
- [177] Smith, M., 2009. ABAQUS/Standard User's Manual, Version 6.9. United States. dassault systèmes simulia corp edition.
- [178] Sollier, A., 2002. Etude des plasmas générés par interaction laser-matière en régime confiné. Application au traitement des matériaux par choc laser. PhD Thesis. Université de Versailles st-Quentin.
- [179] Song, H., 2010. Analyse expérimentale et numérique de la distribution des contraintes résiduelles induites par choc-laser dans les alliages d'aluminium. PhD Thesis. Ecole Nationale des Arts et Métiers.
- [180] Soyama, H., 2019. Comparison between the improvements made to the fatigue strength of stainless steel by cavitation peening, water jet peening, shot peening and laser peening. Journal of Materials Processing Technology 269, 65–78.
- [181] Steinberg, D.J., Cochran, S.G., Guinan, M.W., 1980. A constitutive model for metals applicable at high-strain rate. Journal of Applied Physics 51, 1498–1504.
- [182] Steinberg, D.J., Lund, C.M., 1989. A constitutive model for strain rates from 10 ⁻⁴⁶⁻¹\$. Journal of Applied Physics 65, 1528–1533.
- [183] Sunny, S., Gleason, G., Bailey, K., Mathews, R., Malik, A., 2021a. Importance of microstructure modeling for additively manufactured metal post-process simulations. International Journal of Engineering Science 166, 103515.
- [184] Sunny, S., Gleason, G., Sitaula, K., Malik, A., 2021b. Predictive Modeling of Laser Shock Peening Induced Near-Surface Residual Stress in Alumina. Proceedia Manufacturing 53, 80–91.

- [185] Tedesco, J.W., Landis, D.W., 1989. Wave propagation through layered systems. Computers & Structures 32, 625–638.
- [186] Umbrello, D., M'Saoubi, R., Outeiro, J., 2007. The influence of Johnson–Cook material constants on finite element simulation of machining of AISI 316L steel. International Journal of Machine Tools and Manufacture 47, 462–470.
- [187] Verstraete, K., Azzedine, H., Helbert, A.L., Brisset, F., Bradai, D., Baudin, T., 2018. Accumulative Roll Bonding at Room Temperature of a Bi-Metallic AA5754/AA6061 Composite : Impact of Strain Path on Microstructure, Texture, and Mechanical Properties : Accumulative Roll Bonding at Room Temperature. Advanced Engineering Materials 20, 1700285.
- [188] Vukelic, S., Wang, Y., Kysar, J.W., Yao, Y.L., 2009. Dynamic Material Response of Aluminum Single Crystal Under Microscale Laser Shock Peening. Journal of Manufacturing Science and Engineering 131, 031015.
- [189] Vukelić, S., Kysar, J.W., Lawrence Yao, Y., 2009. Grain boundary response of aluminum bicrystal under micro scale laser shock peening. International Journal of Solids and Structures 46, 3323–3335.
- [190] Wang, L., 2007. Foundations of Stress Waves. Elsevier science edition.
- [191] Wang, Y., Kysar, J.W., Yao, Y.L., 2008. Analytical solution of anisotropic plastic deformation induced by micro-scale laser shock peening. Mechanics of Materials 40, 100–114.
- [192] Wang, Z.P., Sun, C.T., 2002. Modeling micro-inertia in heterogeneous materials under dynamic loading. Wave Motion, 13.
- [193] Warren, A., Guo, Y., Chen, S., 2008. Massive parallel laser shock peening : Simulation, analysis, and validation. International Journal of Fatigue 30, 188–197.
- [194] Weaire, D., Kermode, J.P., Wejchert, J., 1986. On the distribution of cell areas in a Voronoi network. Philosophical Magazine B 53, L101–L105.
- [195] Wu, Y., Zhou, W., Wang, B., Yang, F., 2010. Modeling and characterization of two-phase composites by Voronoi diagram in the Laguerre geometry based on random close packing of spheres. Computational Materials Science 47, 951–961.
- [196] Xiang, Y., Mei, R., Wang, S., Azad, F., Zhao, L., Su, S., 2021. Numerical investigation of the effect of laser shock peening parameters on the residual stress and deformation response of 7075 aluminum alloy. Optik 243, 167446.
- [197] Yarar, E., Erturk, A.T., Karabay, S., 2021. Dynamic Finite Element Analysis on Single Impact Plastic Deformation Behavior Induced by SMAT Process in 7075-T6 Aluminum Alloy. Metals and Materials International 27, 2600–2613.
- [198] Yoshida, K., Brenner, R., Bacroix, B., Bouvier, S., 2009. Effect of regularization of Schmid law on self-consistent estimates for rate-independent plasticity of polycrystals. European Journal of Mechanics - A/Solids, 11.

- [199] Zerilli, F.J., Armstrong, R.W., 1987. Dislocation-mechanics-based constitutive relations for material dynamics calculations. Journal of Applied Physics 61, 1816–1825.
- [200] Zhang, D.N., Shangguan, Q.Q., Xie, C.J., Liu, F., 2015a. A modified Johnson–Cook model of dynamic tensile behaviors for 7075-T6 aluminum alloy. Journal of Alloys and Compounds 619, 186–194.
- [201] Zhang, K., Holmedal, B., Hopperstad, O., Dumoulin, S., Gawad, J., Van Bael, A., Van Houtte, P., 2015b. Multi-level modelling of mechanical anisotropy of commercial pure aluminium plate : Crystal plasticity models, advanced yield functions and parameter identification. International Journal of Plasticity 66, 3–30.
- [202] Zhang, P., Karimpour, M., Balint, D., Lin, J., 2012a. Three-dimensional virtual grain structure generation with grain size control. Mechanics of Materials 55, 89–101.
- [203] Zhang, P., Karimpour, M., Balint, D., Lin, J., Farrugia, D., 2012b. A controlled Poisson Voronoi tessellation for grain and cohesive boundary generation applied to crystal plasticity analysis. Computational Materials Science 64, 84–89.
- [204] Zhang, W., Lawrence Yao, Y., 2001. Microscale Laser Shock Processing—Modeling, Testing, and Microstructure Characterization. Journal of Manufacturing Processes 3, 128–143.
- [205] Zhang, W., Yao, Y.L., Noyan, I.C., 2004a. Microscale Laser Shock Peening of Thin Films, Part 1 : Experiment, Modeling and Simulation. Journal of Manufacturing Science and Engineering 126, 10–17.
- [206] Zhang, W., Yao, Y.L., Noyan, I.C., 2004b. Microscale Laser Shock Peening of Thin Films, Part 2 : High Spatial Resolution Material Characterization. Journal of Manufacturing Science and Engineering 126, 18–24.
- [207] Zhu, K., Vassel, A., Brisset, F., Lu, K., Lu, J., 2004. Nanostructure formation mechanism of alpha-titanium using SMAT. Acta Materialia 52, 4101–4110.



Lucas LAPOSTOLLE

Etude numérique de l'influence d'hétérogénéités microstructurales sur les contraintes résiduelles induites par choc laser

Résumé : Cette thèse traite de la simulation du procédé de grenaillage laser, ou Laser Shock Peening (LSP). Ce procédé vise à introduire des contraintes résiduelles de compression à la surface d'un matériau par impact laser afin d'améliorer son comportement en fatigue. Nous nous intéressons dans ce travail à la modélisation du LSP en tenant compte des hétérogénéités microstructurales provenant de la nature localement anisotrope des matériaux traités par grenaillage laser. Ce manuscrit présente dans un premier chapitre un état de l'art du LSP, du procédé à la simulation. Dans le deuxième chapitre, nous présentons une méthodologie de modélisation et de simulation en une dimension du LSP pour un matériau homogène, pouvant être étendue aisément à un matériau hétérogène. Cette méthodologie permet des simulations rapides du choc laser. Le troisième chapitre est une étude de la propagation d'une onde de contrainte élasto-plastique dans un matériau laminé, qui est une microstructure idéalisée mais permettant déjà d'observer les effets de l'hétérogénéité du matériau. Une démarche d'homogénéisation statique est menée afin de décrire quantitativement ces effets. Le quatrième chapitre traite de la propagation d'une onde de contrainte dans un polycristal. Une approche statistique est menée afin d'étudier l'influence moyenne des microstructures et la dispersion qu'elles induisent sur les champs mécaniques.

Mots clés : Grenaillage laser, Contraintes résiduelles, Onde de contrainte, Microstructure, Laminé, Polycristal, Plasticité cristalline.

Abstract : This thesis deals with the simulation of the laser shock peening (LSP) process. This process aims at introducing compressive residual stresses on the surface of a material by laser impact in order to improve its fatigue behavior. In this work, we are interested in the modeling of LSP by taking into account microstructural heterogeneities coming from the locally anisotropic nature of the materials treated by LSP. This manuscript presents in the first chapter a state of the art of LSP, from the process to the simulations. In the second chapter, we present a methodology for modeling and simulating LSP in one dimension for a homogeneous material, which can be easily extended to a heterogeneous material. This methodology allows fast simulations for laser shock. The third chapter is a study of the propagation of an elastoplastic stress wave in a laminated material, which is an idealized microstructure but already allowing to observe the effects of the heterogeneity of the material. A static homogenization approach is conducted to quantitatively describe these effects. The fourth chapter deals with the propagation of a stress wave in a polycrystral. A statistical approach is conducted to study the average influence of microstructures and the dispersion they induce on the mechanical fields. Keywords : Laser Shock Peening, Residual stresses, Stress wave, Microstructure, Laminate, Polycrystal, Crystal plasticity.