



HAL
open science

Modèle rapide de plasticité cristalline dans les polycristaux pour la fatigue à grand nombre de cycles

Insaf Echerradi

► **To cite this version:**

Insaf Echerradi. Modèle rapide de plasticité cristalline dans les polycristaux pour la fatigue à grand nombre de cycles. Matériaux. École des Ponts ParisTech, 2023. Français. NNT : 2023ENPC0038 . tel-04543665

HAL Id: tel-04543665

<https://pastel.hal.science/tel-04543665v1>

Submitted on 12 Apr 2024

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.

Modèle rapide de plasticité cristalline dans les polycristaux pour la fatigue à grand nombre de cycles

École doctorale N°531, Sciences, Ingénierie et Environnement (SIE)

Sciences des matériaux

Thèse préparée au sein du Laboratoire Navier, UMR 8205, Équipe Matériaux et structures architecturés

Thèse soutenue le *05/12/2023*, par
Insaf ECHERRADI

Composition du jury:

Abdelbacet OUESLATI
Professeur, Université de Lille

Rapporteur

Jean Lin DEQUIEDT
Ingénieur de recherche, CEA DAM / DIF

Rapporteur

Sylvie POMMIER
Professeure, Université Paris Saclay

Examinatrice

Michael PEIGNEY
Professeur, École des Ponts et Chaussées

Directeur de thèse

Daniel WEISZ-PATRAULT
Chargé de recherche, École polytechnique

Encadrant

Remerciements

Aujourd'hui, alors que je clôture ce chapitre académique de ma vie, je tiens à exprimer ma profonde gratitude envers toutes les personnes qui ont contribué à la réalisation de ma thèse. Vos soutiens et encouragements ont été essentiels à chaque étape de ce parcours.

Tout d'abord, je voudrais remercier chaleureusement mon directeur de thèse, Michael PEIGNEY, pour son dévouement, ses précieux conseils sa patience et son expertise inestimable. Votre mentorat m'a guidé à travers les défis intellectuels et les moments de doute, et j'ai énormément appris sous votre direction.

Je tiens également à exprimer ma reconnaissance envers mon encadrant, Daniel WEISZ-PATRAULT, dont l'orientation précise et l'accompagnement attentif ont grandement contribué à la réussite de ce travail de recherche. Son engagement constant dans l'avancement de cette thèse a été une source d'inspiration.

Mes remerciements vont également au professeur Alain EHRLACHER, dont l'idée initiale a été le point de départ de ce projet de thèse. Votre vision et votre soutien ont été déterminants.

J'aimerais exprimer ma sincère gratitude envers Sofia SAKOUT pour sa précieuse contribution et son soutien au début de ce projet.

Je souhaite également adresser mes remerciements aux membres du jury Abdelbacet OUESLATI, Jean Lin DEQUIEDT et Sylvie POMMIER pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant de rapporter et évaluer cette thèse.

Au sein du laboratoire, je tiens à remercier l'ensemble du corps professoral pour son environnement académique stimulant et les opportunités de collaboration qu'il offre. Un remerciement spécial à la secrétaire du département, Marie-Françoise KASPI, pour son aide précieuse, sa patience et son soutien administratif constant.

À mes collègues de thèse, vous avez été des compagnons de voyage exceptionnels dans cette aventure académique.

À ma famille, votre soutien indéfectible et vos sacrifices ont rendu tout cela possible. Je vous suis profondément reconnaissante pour votre amour et votre compréhension. Enfin, à mes amis, pour avoir partagé les joies et les peines de cette période, je vous remercie du fond du cœur.

Ce travail de thèse est le fruit d'un effort collectif, et je suis honorée d'avoir été entourée de personnes aussi extraordinaires. Merci du fond du cœur pour votre contribution à ma réussite académique.

Avec toute ma gratitude,

Abstract

This thesis focuses on the study of the reliability of structures working in fatigue. Where one of its most important topics is the understanding and modeling of fatigue phenomena in both normal and accidental situations. In polycrystals, these phenomena are of a probabilistic nature : for the same cyclic loading, two macroscopically identical specimens have different lifetimes. This is due to the variability of microstructures. The traditional approach is to establish S-N curves experimentally. Due to the random nature of fatigue phenomena, this experimental procedure needs to be repeated a large number of times to be statistically representative. It is generally considered that the safe prediction of service life for a given loading level is the mean number of cycles to failure minus twice the standard deviation. This approach is extremely demanding in terms of experimental effort, but also inadequate in terms of risk analysis.

The main objective of this work is to develop a polycrystalline evolution model integrating plasticity and fracture, fast enough in computation time to enable probabilistic analysis and applicable to the scale of an entire structure. The proposed model is based on the principle of incremental energy minimization and targets low-amplitude loadings, where plasticity is confined to a few critical grains, assumed to be far apart and solicited according to a single slip system. Initially, we assume isotropic and linear kinematic strain-hardening, neglecting elastic interactions between critical grains. The plastic slip increment in each critical grain is then obtained as an explicit function of the material parameters, the loading, and a localization tensor entirely determined by the grain geometry and its elastic moduli. For ellipsoidal grains, this localization tensor is identified with the Eshelby tensor. The validity of the model is investigated by comparison with finite element calculations. The model is then extended to take account of the dominant effects of elastic interaction between grains. Based on an analysis of dislocations, a nonlinear strain-hardening law is also proposed, showing the effect of grain size. Then an extension of the polycrystalline model to this type of law is presented.

For cyclic loading, the proposed approach makes it possible to calculate the incremental evolution of a polycrystal via analytical recurrence formulas, without requiring any spatial discretization. In the simplest situation, where elastic interactions are neglected, we obtain direct formulas giving the stabilized state reached after a large number of cycles. This polycrystalline model is used to analyze the sensitivity of fatigue life to microstructural parameters such as grain size, morphological and crystallographic

textures. The influence of the stress gradient is also discussed. Finally, the applicability of the model to real-world structures is illustrated through the study of stents, small biomedical devices that are subjected to cyclic loading due to heartbeats and for which fatigue life is crucial.

Résumé

Cette thèse concerne l'étude de fiabilité des structures travaillant en fatigue. L'un des sujets importants tient à la compréhension et la modélisation des phénomènes de fatigue tant dans les situations normales qu'accidentelles. Dans les polycristaux, ces phénomènes sont de nature probabiliste : pour un même chargement cyclique, deux éprouvettes macroscopiquement identiques ont en effet des durées de vie différentes. Ceci provient du fait que les microstructures présentent une certaine variabilité. L'approche traditionnelle consiste à établir expérimentalement des courbes S-N. Du fait de la nature aléatoire des phénomènes de fatigue, cette procédure expérimentale doit être répétée un grand nombre de fois pour être statistiquement représentative. On considère en général que la prédiction sécuritaire de la durée de vie pour un niveau de chargement donné se situe à la moyenne du nombre de cycles à rupture moins deux fois l'écart-type. Cette approche est extrêmement lourde en termes d'efforts expérimentaux, mais aussi insuffisante du point de vue de l'analyse des risques.

L'objectif principal de ce travail est de développer un modèle d'évolution polycristallin intégrant plasticité et rupture, suffisamment rapide en temps de calcul pour permettre une analyse probabiliste et applicable à l'échelle d'une structure entière. Le modèle proposé repose sur un principe de minimisation de l'énergie incrémentale et cible les chargements de faible amplitude, pour lesquels la plasticité est confinée à quelques grains critiques supposés éloignés les uns des autres et sollicités selon un seul système de glissement. Dans un premier temps, nous nous plaçons dans le cadre d'un écrouissage isotrope et cinématique linéaire, en négligeant les interactions élastiques entre grains critiques. L'incrément de glissement plastique dans chaque grain critique est alors obtenu comme une fonction explicite des paramètres du matériau, du chargement, et d'un tenseur de localisation entièrement déterminé par la géométrie du grain et ses modules élastiques. Pour des grains ellipsoïdaux, ce tenseur de localisation s'identifie au tenseur d'Eshelby. La validité du modèle est étudiée par une comparaison avec des calculs aux éléments finis. Le modèle est ensuite étendu pour prendre en compte les effets dominants de l'interaction élastique entre grains. A partir d'une analyse des dislocations, on propose également une loi d'écrouissage non linéaire faisant apparaître l'effet de la taille des grains. Une extension du modèle polycristallin à ce type de loi est présentée.

Pour un chargement cyclique, l'approche proposée permet de calculer l'évolution incrémentale d'un polycristal via des formules de récurrence analytiques, sans nécessiter aucune discrétisation spatiale. Dans la situation la plus simple où les interactions

élastiques sont négligées, on obtient des formules directes donnant l'état stabilisé atteint au bout d'un grand nombre de cycles. Ce modèle polycristallin est exploité pour une analyse de la sensibilité de la durée de vie par rapport aux paramètres microstructuraux, tels que la taille des grains, les textures morphologiques et cristallographiques. L'influence du gradient de contraintes est également discutée. Enfin, l'applicabilité du modèle a des structures réelles est illustré sur l'étude des stents, dispositifs biomédicaux de petite taille qui sont soumis à un chargement cyclique en raison des battements cardiaques et pour lesquels la durée de vie en fatigue est cruciale.

Table des matières

1	Introduction	1
2	Revue de la littérature	4
2.1	Introduction	4
2.2	Rappels de mécanique linéaire de la rupture	5
2.3	Description des phénomènes de fatigue	7
2.3.1	Régimes de fatigue	7
2.3.2	Mécanismes conduisant à la fatigue des métaux	8
2.3.3	Courbes $S-N$	10
2.3.4	Loi de cumul de Miner et chargements aléatoires	11
2.3.5	Fatigue oligocyclique et lois de Paris	12
2.3.6	Fatigue à grand nombre de cycles et modèle de Dang Van	13
2.3.7	Méthode directe cyclique de Maitournam	16
2.4	Modèles de plasticité dans les polycristaux	16
2.4.1	Mise en évidence de l'influence de la microstructure	16
2.4.2	Plasticité cristalline	17
2.4.3	Aspects énergétiques de la plasticité	19
2.4.4	Modèles en champs complets à l'échelle du polycristal	20
2.4.5	Modèles d'inclusion	21
2.5	Résumé et choix du régime de fatigue étudié	22
2.6	Plan de la thèse	24
3	Modèle mésoscopique rapide pour une inclusion type Eshelby	26
3.1	Introduction	26
3.2	Plasticité cristalline dans une inclusion type Eshelby	27
3.3	Modèle mésoscopique pour une inclusion type Eshelby	28
3.3.1	Stratégie du modèle mésoscopique	28
3.3.2	Approche énergétique	29

3.3.2.1	Énergie potentielle élastique	30
3.3.2.2	Énergie dissipée	33
3.3.3	Minimisation de l'énergie incrémentale	34
3.4	Mise en oeuvre	35
3.4.1	Approximation des grains en ellipsoïdes	35
3.4.2	Détermination du système de glissement activé	37
3.5	Domaine de validité du modèle mésoscopique	38
3.5.1	Construction du modèle éléments finis	38
3.5.2	Résultats et discussions	40
3.5.2.1	Taille et forme du grain	42
3.5.2.2	Amplitude du chargement macroscopique	43
3.6	Conclusion	45
4	Modèle mésoscopique rapide pour les polycristaux	46
4.1	Introduction	46
4.2	Extension du modèle mésoscopique aux polycristaux	47
4.2.1	Énergie potentielle d'un polycristal	47
4.2.1.1	Formulation	47
4.2.1.2	Propriétés des tenseurs S_{kl}	49
4.2.2	Minimisation de l'énergie incrémentale	49
4.2.2.1	Cas sans interaction	51
4.2.2.2	Cas avec interaction faible	51
4.3	Application à deux grains dans une matrice élastique	54
4.4	Génération de polycristaux	57
4.5	Mise en oeuvre de la méthode simplifiée sur une tessellation arbitraire	59
4.6	Validation	61
4.6.1	Résultats	62
4.7	Conclusion	65
5	Formulations directes et critère de fatigue	66
5.1	Introduction	66
5.2	Approche directe pour un chargement cyclique	67
5.2.1	État asymptotique pour un chargement cyclique	67
5.2.2	Validation par le modèle mésoscopique	70
5.3	Application statistique des formules directes	71
5.3.1	Critère de fatigue mésoscopique	71
5.3.2	Influence de la forme du grain	72

5.3.3	Influence de l'orientation cristalline	74
5.3.4	Aspects probabilistes	76
5.3.4.1	Fonction de survie pour un grain critique d'orientation aléatoire	76
5.3.4.2	Fonction de survie pour un VER avec M_C grains cri- tiques	80
5.4	Conclusion	81
6	Modèle mésoscopique pour les cristaux à trois phases d'écroissage	83
6.1	Introduction	83
6.2	Modèle d'écroissage à trois phases	84
6.2.1	Minimisation de l'énergie incrémentale	87
6.2.2	Cas sans interaction	88
6.2.3	Cas des interactions faibles	89
6.2.4	Critère de fatigue et de rupture	92
6.3	Résultats et discussion	93
6.3.1	Validation des formules stabilisées	93
6.3.2	Comparaison à la loi d'écroissage linéaire	93
6.3.3	Analyse de sensibilité	95
6.3.3.1	Orientation cristallographique	97
6.3.3.2	Tailles des grains	102
6.3.3.3	Inclinaison de l'ellipse	104
6.3.3.4	Circularité de l'ellipse	105
6.4	Conclusion	107
7	Application au cas du stent	109
7.1	Introduction	109
7.2	Présentation du cas d'étude : Stents métalliques	110
7.2.1	Types de stents	110
7.2.2	Fonctionnement et cycle de vie	111
7.3	Modélisation par éléments finis	112
7.3.1	Passage d'une étude 3D à 2D	114
7.3.2	Zones critiques étudiées	115
7.4	Résultats et discussion	117
7.4.1	Influence de l'orientation cristalline	117
7.4.2	Influence du nombre de grains	119
7.4.3	Influence entre grains voisins	120

7.5 Conclusion	123
8 Conclusion générale	124
A Inclusion elliptique dans un demi-plan élastique isotrope	127
B Passage d'un modèle bidimensionnel à un modèle tridimensionnel et ses implications	131
C Tenseur d'Eshelby	133
C.1 Tenseur d'Eshelby pour des inclusions bidimensionnelles :	133
C.2 Tenseur Eshelby pour des inclusions tridimensionnelles	134
Bibliographie	135

Table des figures

2.1	Définition des différents régimes de fatigue. La sévérité est noté S et le nombre de cycle à rupture $N_f(S)$. Les courbes schématiques contrainte/déformation (σ, ε) correspondent aux différents modes de déformation cyclique.	8
2.2	Schéma de principe de la dispersion expérimentale des essais de fatigue.	10
3.1	Structure cristalline	27
3.2	Réseaux cristallins usuels	28
3.3	Un grain I polygonal approximé en ellipse, (bleu) Méthode 1, (rouge) Méthode 2	36
3.4	Exemple de système de glissement dans le grain I	37
3.5	Cartes de glissement plastique pour une amplitude de chargement de $103MPa$	41
3.6	Erreur relative en fonction du glissement plastique dans <i>Freefem++</i> avec deux exemples des grains correspondant à une erreur élevée et une erreur faible.	42
3.7	Erreur relative en fonction du de la densité.	43
3.8	Cartes de glissement plastique pour une amplitude de chargement de $120 MPa$	44
3.9	Erreur relative en fonction de l'amplitude du chargement, et évolution du glissement plastique sur le système dominant en fonction de l'amplitude du chargement	44
4.1	Schéma explicatif (a). Glissement plastique en fonction de la distance pour (b) dans le grain 1 et (c) dans le grain 2	56
4.2	Polycristaux tridimensionnels construit dans <i>Neper</i> dans des domaines spatiaux différents	57
4.3	Polycristaux bidimensionnels construit dans <i>Neper</i> pour des morphologies différentes	58

4.4	Deux distributions d'orientations cristallines suivant des densités de probabilités différentes (a) Loi uniforme (b) Loi gaussienne.	59
4.5	Histogrammes de la distribution appliquée ainsi que la fonction de densité de probabilité cible en ligne rouge (a) Loi uniforme (b) Loi gaussienne	59
4.6	Une tessellation de 50 grains approximés en ellipses (a) avec exemple de grains voisins (b)	60
4.7	Glissements plastiques calculés (a) par EF sur <i>Freefem++</i> (b) par le modèle mésoscopique sur <i>Matlab</i>	62
4.8	Erreur relative tracée en fonction du glissement plastique sur <i>Freefem++</i> dans le cas d'interaction faible puis dans le cas sans interaction	63
4.9	Cartes de glissement plastique, orientation et erreur	64
5.1	Fonction $f(t)$ du chargement appliqué aux frontières du VER.	68
5.2	Validation par modèle mésoscopique	70
5.3	Repère de l'ellipse $(O, \underline{e}_1, \underline{e}_2)$ et du système de glissement activé $(O, \underline{t}_s, \underline{n}_s)$	72
5.4	Facteur d'amplification géométrique capturant l'influence de la forme du grain (orientation x et rapport d'aspect r) sur l'indicateur de fatigue.	73
5.5	Les trois critères de fatigue	76
5.6	Angle θ du système de glissement actif en fonction de l'orientation cristalline Θ	77
5.7	La densité de probabilité de y approximée à partir d'un échantillon de 1 000 000 orientations cristallines	78
5.8	Fonction de survie pour un grain critique d'orientation aléatoire. Cas où $f^m = 0$, $\sigma^0 = (\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_2 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_1)/2$ et $a = 0.7$	79
5.9	Amplitude médiane de chargement $f_{50\%}^a$ pour un VER avec M_C grains critiques. Cas où $f^m = 0$, $\sigma^0 = (\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_2 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_1)/2$ et $a = 0.7$	81
6.1	Évolution de la limite d'élasticité du cristal en fonction du glissement plastique cumulé.	84
6.2	Validation par modèle mésoscopique	93
6.3	Boucles d'hystérésis pour les deux lois d'érouissage : (a) Linéaire, (b) non-linéaire	94
6.4	Régimes de fatigue obtenus pour un grain avec érouissage à trois phases	95
6.5	Algorithme du calcul du nombre de cycle à la rupture.	97
6.6	σ_{meso} et N_f sont tracés en fonction de l'orientation cristalline Θ	98
6.7	σ_{meso} et N_f sont tracés en fonction de l'orientation cristalline Θ	99

6.8	N_f est tracé en fonction de l'orientation cristalline Θ .	99
6.9	Diagramme à moustaches.	100
6.10	Courbe $S-N$ et paramètres statistiques en fonction de l'orientation cristalline Θ .	102
6.11	Courbe $S-N$ et paramètres statistiques en fonction de la taille des grains	103
6.12	Courbe $S-N$ et paramètres statistique en fonction de l'inclinaison des grains.	105
6.13	Courbe $S-N$ et paramètres statistique en fonction de la circularité du grain critique pour une orientation cristalline de 30° .	106
6.14	Évolution du nombre de cycles à la rupture en fonction la circularité pour des niveaux de chargements différents.	107
7.1	Illustration des deux types de stents.	111
7.2	Schéma d'installation du stent dans un vaisseau sanguin.	111
7.3	Géométrie du motif du stent.	112
7.4	Contraintes appliquées et simulées lors de la phase systole	113
7.5	Maillage tétraédrique et raffinement sur le coude du stent	113
7.6	Visualisation du champs de contrainte de Von-Mises en 3D.	114
7.7	Visualisation du champs de contrainte de Von-Mises en 2D.	115
7.8	Zone \mathcal{A} : Élément du coude de la zone la plus sollicitée du stent	116
7.9	Zone \mathcal{B} : Élément du milieu du coude (région moyennement sollicitée)	116
7.10	Polycristal dans la zone \mathcal{B}	117
7.11	Histogrammes de nombre de cycles à rupture pour deux configurations différentes.	118
7.12	Histogrammes de nombre de cycles à rupture pour deux distributions de lois de probabilité différentes.	118
7.13	Histogrammes du nombre de cycles à rupture pour la zone \mathcal{A} à chargement moyen.	119
7.14	Histogrammes du nombre de cycles à rupture pour la zone \mathcal{B} à chargement moyen.	120
7.15	Cartes d'orientation cristalline pour les six pires configurations des 3500 tirages.	121
7.16	Cartes d'orientation cristalline pour les six meilleures configurations des 3500 tirages.	121
7.17	(a) GP cumulé pour la configuration figure 7.15c, (b) GP cumulé pour la configuration figure 7.16f	122

7.18	Système de glissement activé en fonction de l'orientation cristalline	122
A.1	127
B.1	Processus du passage du modèle 2D au modèle 3D	131
B.2	Résultats préliminaires du modèle 3D	132

Chapitre 1

Introduction

La fatigue des métaux est un mode de rupture sous chargement cyclique très largement étudié dans les différents domaines associés à l'ingénierie mécanique du fait de son importance pour dimensionner et maintenir les structures ainsi que prévenir les accidents. Au cours de la seconde moitié du XX-ième siècle la compréhension des phénomènes qui sous-tendent ce type de rupture a très largement progressé. Par exemple il est bien établi que la plasticité cristalline, qui opère dans chacun des cristaux constituant le métal vu comme un assemblage polycristallin, joue un rôle important dans les phénomènes de fatigue. Des modèles prédictifs associés à des campagnes d'essais permettent désormais aux ingénieurs de dimensionner les structures et de garantir la sécurité. Cependant, ces approches de dimensionnement classiques reposent sur des hypothèses assez fortes. Par exemple, le comportement du matériau est souvent réputé connu et déterministe. Ceci peut être problématique dans la mesure où bien que la fatigue repose en partie sur des aspects déterministes comme la plasticité cristalline, on observe une dispersion des résultats lors des campagnes d'essais : deux éprouvettes identiques sur le plan macroscopique cassent à des nombres de cycles différents pour une intensité de chargement donnée. Cela s'explique par le fait qu'un certain nombre de facteurs aléatoires influencent significativement les phénomènes liés à la fatigue : les défauts de surface, les porosités internes, la forme et la taille des grains, la répartition des orientations cristallines etc. En effet, ces facteurs sont en général inconnus à l'échelle macroscopique (on ne connaît pas par exemple la microstructure détaillée pour chaque pièce) et il est donc inévitable de les considérer comme des variables aléatoires épistémiques, c'est-à-dire traduisant un certain degré d'ignorance ou d'incertitude.

Pour un certain nombre d'applications les démarches usuelles bien maîtrisées par les ingénieurs ne sont donc pas optimales, dans la mesure où les matériaux métalliques sont des polycristaux dont on ignore en général à l'échelle macroscopique le détail de

l'arrangement des grains, des orientations cristallines et des défauts. Le comportement de ces derniers est donc incertain et doit être modélisé comme on l'a vu par une variable aléatoire. Ce problème de dispersion des résultats et d'incertitude est traité en général de manière exploratoire. Des campagnes d'essais doivent être réalisées et permettraient dans l'idéal de casser un grand nombre d'éprouvettes pour chaque type de chargement, de sorte à pouvoir réaliser une statistique fiable de la durée de vie en fatigue. En pratique, seules quelques éprouvettes par type de chargement sont testées pour des raisons évidentes de coût et de temps. Les règles de l'art consistent à dimensionner par sécurité en retenant pour chaque type de chargement étudié le nombre de cycle à rupture médian moins deux écart-types [1]. Si cette approche permet en effet d'éviter la majeure partie des ruptures accidentelles elle soulève néanmoins deux difficultés. La première est l'estimation médiocre de la médiane et de l'écart-type du fait du faible nombre d'éprouvettes. La seconde, plus sérieuse, est le fait que ce choix de deux écart-types ne permet pas de quantifier la probabilité de rupture, en particulier si l'on cherche à éviter des événements rares. En effet, si l'on place forfaitairement la limite de durée de vie à deux écart-types du nombre de cycle à rupture médian, on a encore 2,5% des éprouvettes qui casseront avant ce seuil pour une distribution normale par exemple, ce qui est loin d'être rare. On peut bien sûr considérer des quantiles d'ordre p au lieu du critère de deux écart-types mais la difficulté concernant l'identification de la probabilité d'événements rares reste la même.

Cette limite dans l'approche traditionnelle de dimensionnement par les ingénieurs est très contraignante notamment pour les démonstrations de sûreté, où il s'agit de démontrer que la probabilité de rupture est majorée par un certain seuil acceptable (en général très bas), ce qui implique de savoir correctement quantifier la densité de probabilité pour les événements très rares. On pense par exemple aux démonstrations de sûreté dans le domaine de la production d'énergie bas carbone comme l'industrie nucléaire, tant pour la conception de nouvelles centrales que pour le prolongement de la vie du parc nucléaire existant. De même, on retrouve ce type de problématique dans l'industrie ferroviaire ou pour les structures obtenues ou réparées par fabrication additive métallique du fait des microstructures très spécifiques et des nombreux défauts qui y sont observés. Ces applications industrielles impliquent des phénomènes de fatigue à grand nombre de cycles allant de 10^6 à 10^9 et des événements de rupture très rares, il convient donc de développer une approche permettant d'estimer finement la densité de probabilité de rupture en fatigue pour évaluer le risque d'événements à très faible probabilité.

Compte tenu du problème de recherche et des mécanismes de rupture en fatigue que nous avons décrits, ce travail de thèse cherche à développer des outils rapides pour simuler les déformations plastiques cycliques et la rupture en fatigue à l'échelle du polycristal. En effet, nous avons vu que l'une des difficultés, pour conduire une démarche de preuve de sûreté, est la variabilité matériau, c'est-à-dire la dispersion statistique intrinsèque de la durée de vie d'un matériau pour un chargement donné. Cette variabilité est due à la répartition aléatoire des défauts pré-existants et du détail de la microstructure (grains, orientations cristallines etc.) qui affectent significativement la répartition des déformations plastiques à l'origine des phénomènes de fatigue. Différentes approches, que nous passerons en revue au chapitre 2, existent pour simuler la plasticité cristalline des polycristaux. Cependant les applications que nous avons citées impliquent un grand nombre de cycles, et donc la problématique du temps de calcul devient centrale. Dans ce travail nous cherchons à développer une approche simplifiée permettant de simuler rapidement la plasticité des polycristaux soumis à un grand nombre de cycles de chargement. Cela peut ainsi permettre de simuler la durée de vie d'un grand nombre de polycristaux différents et de construire la distribution de probabilité du nombre de cycle à rupture pour chaque type de chargement cyclique envisagé. On peut donc construire des courbes $S-N$ (ou de Wöhler), reportant la sévérité du chargement en fonction du nombre de cycles à rupture, qui soient entièrement probabilistes et exploitables pour aider au dimensionnement des structures et dans la démarche de preuve de sûreté. En effet, les résultats expérimentaux disponibles peuvent permettre de caler le modèle, qui peut ensuite être exploité intensivement pour affiner la distribution de probabilité de la durée de vie.

Quoique fondés sur un volume élémentaire représentatif soumis à un chargement macroscopique homogène, les travaux que nous présentons ici permettent également de prendre en compte de manière indirecte les effets de gradient de contraintes qui ont un effet sur la durée de vie en fatigue.

Chapitre 2

Revue de la littérature

Sommaire

2.1	Introduction	4
2.2	Rappels de mécanique linéaire de la rupture	5
2.3	Description des phénomènes de fatigue	7
2.3.1	Régimes de fatigue	7
2.3.2	Mécanismes conduisant à la fatigue des métaux	8
2.3.3	Courbes $S-N$	10
2.3.4	Loi de cumul de Miner et chargements aléatoires	11
2.3.5	Fatigue oligocyclique et lois de Paris	12
2.3.6	Fatigue à grand nombre de cycles et modèle de Dang Van	13
2.3.7	Méthode directe cyclique de Maitournam	16
2.4	Modèles de plasticité dans les polycristaux	16
2.4.1	Mise en évidence de l'influence de la microstructure	16
2.4.2	Plasticité cristalline	17
2.4.3	Aspects énergétiques de la plasticité	19
2.4.4	Modèles en champs complets à l'échelle du polycristal	20
2.4.5	Modèles d'inclusion	21
2.5	Résumé et choix du régime de fatigue étudié	22
2.6	Plan de la thèse	24

2.1 Introduction

Dans ce chapitre nous abordons succinctement certains résultats issus de la littérature, qui permettent de situer les travaux que nous présentons dans ce mémoire. Après quelques rappels nécessaires de mécanique linéaire de la rupture, nous centrons notre propos sur les différents concepts et outils permettant de comprendre, de tester et de simuler les phénomènes de fatigue. La fatigue étant extrêmement étudiée dans la littérature scientifique, nous ne cherchons pas ici à dresser un tableau homogène

des différentes questions de recherche sur ce sujet, on pourra consulter pour cela des ouvrages de référence [2]. Nous avons davantage axé notre propos sur certains aspects qui permettent d'introduire et de circonscrire la problématique particulière de cette thèse, à savoir le développement d'outils numériques rapides pour simuler la variabilité des ruptures en fatigue à l'échelle du polycristal.

2.2 Rappels de mécanique linéaire de la rupture

La rupture en fatigue se distingue de la rupture fragile par des mécanismes dissipatifs très différents. La rupture fragile, implique qu'une ou plusieurs fissures se propagent brutalement en scindant la matière, ce qui a pour effet de baisser l'énergie élastique stockée dans la structure en créant des surfaces libres (i.e., lèvres de la fissure) au prix d'une dissipation d'énergie, traduisant le caractère irréversible de la transformation, associée à la scission des particules successives en tête de fissure. Des calculs thermodynamiques, montrent que sous les trois hypothèses fondamentales de la mécanique linéaire de la rupture, la puissance dissipée par unité de profondeur lors de la propagation d'une fissure s'écrit comme le produit de la vitesse d'avance du front de fissure noté \dot{a} (m.s^{-1}) et d'une énergie de fissuration par unité de surface G_c (J.m^{-2}) appelé énergie de Griffith. En d'autres termes, pour déterminer si une fissure se propage, un critère énergétique appelé *taux de relaxation d'énergie* noté G (J.m^{-2}) [3, 4], qui s'exprime comme une intégrale invariante selon le contour d'intégration en hyper-élasticité [5], peut être comparé à une valeur *critique* G_c supposée caractériser le matériau. Lorsque le taux de relaxation d'énergie est plus faible strictement que la valeur critique $G < G_c$ la fissure ne se propage pas et lorsque la valeur critique est atteinte $G = G_c$ la fissure se propage. En tête de fissure les contraintes augmentent très significativement, conduisant la plupart des matériaux soit à plastifier soit à activer d'autres mécanismes dissipatifs dans une zone appelé *zone d'élaboration* (ou zone de process). Si la zone d'élaboration reste *confinée* (c'est-à-dire qu'on peut en faire le tour sans toucher les frontières du domaine) et que le reste de la structure reste hyper-élastique, on peut démontrer grâce au principe de Saint-Venant et à l'invariance de l'intégrale de contour, qu'il n'est pas nécessaire de réaliser des calculs complexes incluant les non-linéarités en tête de fissure. Non seulement des calculs hyper-élastiques suffisent pour correctement caractériser le taux de relaxation d'énergie mais il est de plus possible d'utiliser les champs de déplacement et de contrainte en tête de fissure sans perte de précision, alors que justement la solution purement hyper-élastique est éloignée de la réalité dans la zone d'élaboration. Ce

résultat fondamental de la mécanique linéaire de la rupture a conduit à exploiter la notion de *facteur d'intensité de contrainte* K_I, K_{II}, K_{III} (MPa.m^{1/2}) (où l'indice fait référence aux modes de propagation de la fissure), qui est issue de la solution de Westergaard [6] consistant en un développement asymptotique du champ de contrainte en tête de fissure pour un problème élastique, ce qui s'écrit au premier ordre :

$$\begin{aligned}
\sigma_{xx} &= \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \left(1 - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{3\theta}{2}\right)\right) - \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \left(2 + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{3\theta}{2}\right)\right) \\
\sigma_{xy} &= \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{3\theta}{2}\right) + \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \left(1 - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{3\theta}{2}\right)\right) \\
\sigma_{yy} &= \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \left(1 + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{3\theta}{2}\right)\right) + \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{3\theta}{2}\right) \\
\sigma_{xz} &= -\frac{K_{III}}{\sqrt{2\pi r}} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\
\sigma_{yz} &= \frac{K_{III}}{\sqrt{2\pi r}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)
\end{aligned} \tag{2.1}$$

Le champ de contrainte est singulier, c'est-à-dire infini en tête de fissure et on démontre que la singularité est en $r^{-1/2}$ (où r est la distance du point considéré à la tête de fissure). Les facteurs d'intensité de contrainte se lisent comme les coefficients multiplicatifs des différents termes en $r^{-1/2}$ dans le développement et caractérisent donc l'intensité de la singularité du champ de contrainte en tête de fissure. Grâce à la formule d'Irwin [7] le taux de relaxation d'énergie peut s'écrire en fonction des facteurs d'intensité de contrainte :

$$G = \frac{1 - \nu^2}{E} (K_I^2 + K_{II}^2) + \frac{1}{2\mu} K_{III}^2 \tag{2.2}$$

Où E (MPa) est le module d'Young, ν coefficient de Poisson et μ (MPa) le coefficient de cisaillement. Lorsque la fissure se propage en mode I, on peut donc également définir un facteur d'intensité de contrainte critique K_{Ic} (MPa.m^{1/2}) appelé *ténacité*, de telle sorte que si $K_I < K_{Ic}$ la fissure ne se propage pas et si $K_I = K_{Ic}$ la fissure se propage. Il faut noter que les facteurs d'intensité de contrainte dépendent de la taille notée a de la fissure en \sqrt{a} et linéairement de la contrainte locale σ avec un facteur multiplicatif adimensionnel qui dépend de la forme de la fissure et de son emplacement par rapport aux surfaces libres.

Par ailleurs, le mode privilégié de propagation fragile d'une fissure est le mode I, c'est l'une des raisons qui justifient que la loi de Paris [8], que nous verrons par la

suite, repose sur le mode I. Lorsque le chargement sollicite des fissures en mode mixte (I+II+III), très souvent la propagation fragile se réoriente relativement vite vers un mode I. Pour s'assurer que la propagation rejoint rapidement un mode I, on trouve différentes lois déterminant la direction que prend une fissure lorsqu'elle se propage en fonction des champs locaux en tête de fissure. On peut citer par exemple le maximum de la contrainte orthoradiale locale [9], le maximum du taux de relaxation d'énergie [10], où les développements limités de facteurs d'intensité de contrainte en tête de fissure [11], qui donnent tous des résultats très similaires sans être confondus. Des approches plus énergétiques comme le critère de Francfort & Marigo [12] permettent de déterminer le trajet de fissure comme une suite d'états stables par minimisation de l'énergie totale comprenant l'énergie élastique stockée, le travail des efforts extérieurs et l'énergie dissipée $G_c \Delta l$ au cours d'un accroissement de fissure de taille Δl .

2.3 Description des phénomènes de fatigue

2.3.1 Régimes de fatigue

Comme le montre la figure 2.1, on distingue classiquement différents régimes de fatigue : la fatigue à faible nombre de cycles dite *oligocyclique*, et la fatigue à grand ou très grand nombre de cycles. On parle également de vie courte pour les très faibles nombres de cycles, d'endurance limitée lorsque le nombre de cycles à rupture est plus important, et d'endurance infinie lorsque les cycles de chargement ne permettent pas d'atteindre la rupture. Différentes typologies de cycle de déformation locale sous-tendent ces niveaux d'endurance. On parle de *Rochet*, lorsque le chargement est suffisamment important pour induire des déformations plastiques qui s'accumulent à chaque cycle, de sorte que la déformation totale dans une direction ne cesse d'augmenter. Cette situation se produit en général lors de l'amorce d'un défaut significatif dont la taille augmente de manière importante à chaque cycle, ce qui a tendance à induire des déformations plastiques importantes sous forme de cavitation plastique par exemple. Cette situation conduit en général à une rupture ductile très précoce. Les déformations plastiques locales peuvent également se stabiliser après un certain temps, sur un cycle qui se reproduit, on parle d'*accommodation*. La déformation plastique cumulée (i.e., norme du tenseur des déformations plastiques) augmente donc à chaque cycle alors que la déformation plastique se compense au cours du cycle (traction/compression par exemple). Ce type de cycle de déformation stabilisé s'obtient lorsque l'amplitude du chargement permet de dépasser à chaque cycle la limite élastique et d'écrouir le matériau. Si après un certain nombre de cycles de chargement

l'écoulement plastique se réduit au point que les cycles suivants restent parfaitement élastiques on parle d'*adaptation*. Cela se produit lorsque l'amplitude du chargement permet initialement de plastifier la structure, mais du fait de l'écrouissage, ne permet plus d'atteindre la limite élastique après un certain nombre de cycles. La déformation plastique cumulée n'évolue donc plus. Enfin, le chargement peut être insuffisant pour plastifier la structure, qui reste alors parfaitement *élastique*.

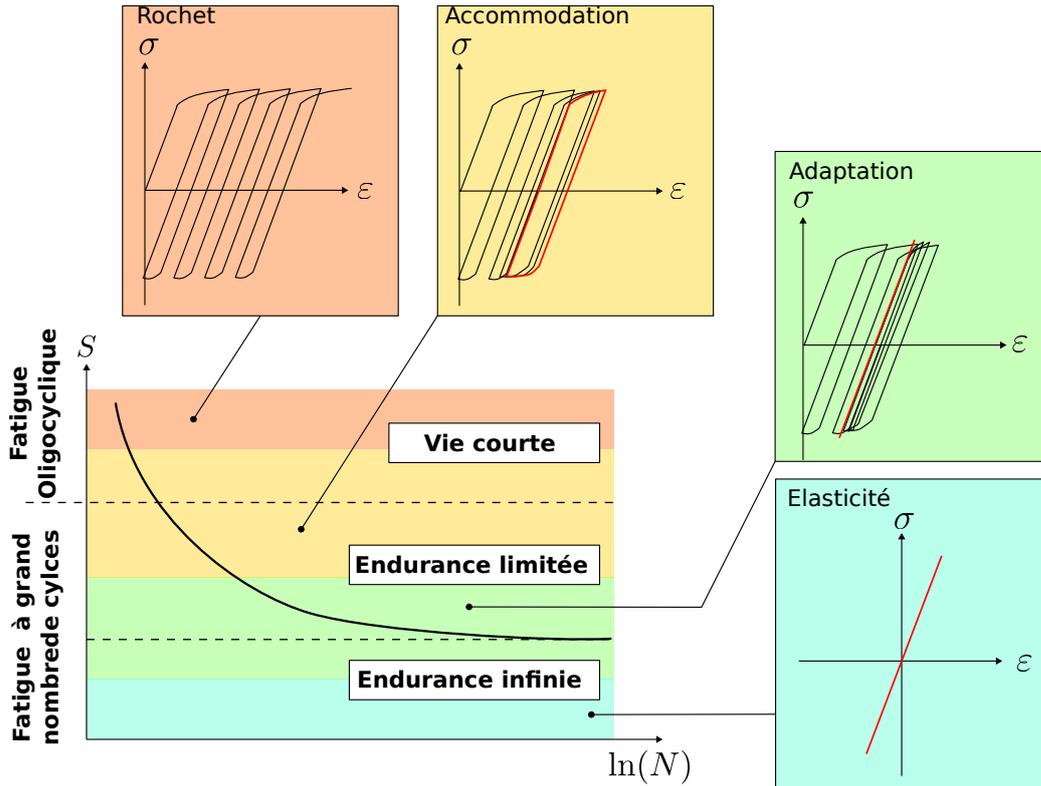


FIGURE 2.1 – Définition des différents régimes de fatigue. La sévérité est noté S et le nombre de cycle à rupture $N_f(S)$. Les courbes schématiques contrainte/déformation (σ, ε) correspondent aux différents modes de déformation cyclique.

2.3.2 Mécanismes conduisant à la fatigue des métaux

Pour les chargements cycliques relativement importants, la fatigue dite oligocyclique consiste en un accroissement progressif de la taille des défauts comme des porosités ou fissures [13]. La propagation des défauts est dite *sous-critique* dans le sens où la ténacité n'est pas atteinte. Cet accroissement de la taille des défauts ne se fait donc pas par des mécanismes de fissuration au sens de la mécanique linéaire de la rupture, mais davantage par déformation plastique autour des défauts [14]. En effet, même si le matériau peut rester élastique à l'échelle macroscopique, des déformations

plastiques tendent à se localiser, à l'échelle de la microstructure, près des concentrateurs de contraintes que sont les pores ou les amorces de fissure. Après chaque cycle de chargement, la déformation plastique étant irréversible, la taille des défauts a évolué. Lorsque la taille d'un défaut notée a est suffisante pour que le facteur d'intensité de contrainte (évoluant en \sqrt{a}) atteigne la ténacité (ou de manière équivalente pour que le taux de relaxation d'énergie G atteigne l'énergie de rupture G_c), la structure se fissure de manière fragile et on dit que l'on a atteint la rupture en fatigue. La période d'évolution sous-critique des défauts peut être plus ou moins longue en terme de nombre de cycles de chargement avant rupture, ce que l'on appelle la *durée de vie en fatigue*.

Ce mécanisme de progression sous-critique est peu dépendant de la microstructure du matériau, et dépend au premier ordre de la distribution de taille des défauts de surface. En effet, la fatigue consistant à accroître la taille des défauts jusqu'à une valeur limite, il est clair que la durée de vie en fatigue dépend fortement de la taille des défauts. La rupture en fatigue intervient donc souvent près d'une surface libre dans la mesure où 1) les défauts sont en général plus importants en surface que dans la masse du matériau et 2) le facteur d'intensité de contrainte y est aussi plus élevé, ce qui a pour effet de réduire la taille limite à atteindre avant de propager la fissure de manière brutale.

En revanche, pour la fatigue à grand ou très grand nombre de cycles, c'est-à-dire pour des chargements cycliques d'intensité faible devant la limite élastique macroscopique du matériau, la progression des défauts de surface initiaux peut être bloquée par les joints de grain [13]. Cependant une accumulation des glissements plastiques selon les plans cristallins de certains grains permet d'amorcer des défauts au sein de ces grains en se localisant sous forme de bandes de glissement [15]. Le mécanisme sous-jacent de la plasticité cristalline (glissement de plans cristallins) est le mouvement et la création de lignes de défauts atomiques appelées *dislocations* qui peuvent se repousser ou s'annihiler en fonction de leur nature. La densité de dislocations dans les bandes de glissement étant très élevée, les annihilations qui s'y produisent conduisent à la formation de cavité faisant office d'amorce de fissure [16]. Ainsi la fatigue à (très) grand nombre de cycles se caractérise davantage par l'initiation de nouveaux défauts dans les grains que dans les phénomènes de propagation de ces derniers, qui ne contribuent que pour une faible part à la durée de vie totale.

2.3.3 Courbes S - N

Que ce soit pour la fatigue oligocyclique ou la fatigue à grand nombre de cycles, l'étude expérimentale des caractéristiques en fatigue d'un matériau se fait le plus souvent par des essais sous chargement cyclique sur des éprouvettes standardisées identiques. On définit la sévérité du cycle de chargement S comme un scalaire en MPa, qui peut être par exemple l'amplitude de la contrainte appliquée au cours de chaque cycle pour des essais en traction uniaxiale, ou l'amplitude de la contrainte équivalente pour des chargements triaxiaux. Pour chaque éprouvette on détermine le nombre de cycles à rupture $N_f(S)$, de sorte que l'on peut construire une courbe S - N (ou courbe de Whöler) [17] présentant la sévérité du chargement en fonction du nombre de cycles à rupture (souvent en échelle logarithmique). Cependant plusieurs éprouvettes n'ont pas la même durée de vie pour un même chargement cyclique de sévérité S , ce qui conduit à une dispersion des résultats comme on peut le constater figure 2.2 (similaire à celle présentée dans [18]). On introduit classiquement un seuil probabilité

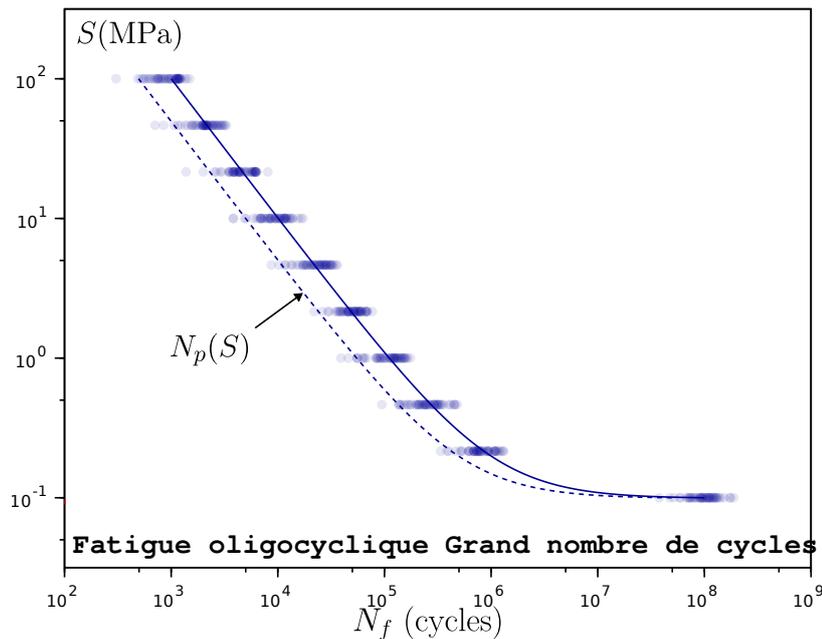


FIGURE 2.2 – Schéma de principe de la dispersion expérimentale des essais de fatigue.

$p \in (0, 1)$ pour construire un nombre, noté $N_p(S)$, tel que la probabilité qu'une éprouvette cassent pour un nombre $N_f(S)$ plus faible que $N_p(S)$ est p , autrement dit $\mathbb{P}(N_f(S) \leq N_p(S)) = p$ (où \mathbb{P} est une mesure de probabilité). Bien évidemment pour $p = 0.5$ on retrouve la médiane et pour $p = 0.25$ le premier quartile de la distribution. On appelle $N_p(S)$ le quantile d'ordre p de la distribution. La courbe donnant la sévérité en fonction de $N_p(S)$ est appelé courbe S - N d'ordre p , et l'ensemble de ces

courbes est appelé le champ des courbes S - N [19]. Si les campagnes d'essais mettent en jeu un nombre suffisant de reproductions des mêmes essais pour chaque sévérité S , le champ des courbes S - N peut être caractérisé, ce qui permet de synthétiser les résultats expérimentaux.

Il existe différentes représentations analytiques permettant d'interpoler l'allure générale d'une courbe S - N . La loi la plus courante est celle de Basquin [20] qui postule que la courbe S - N est linéaire en échelle log-log, ce qui se lit :

$$\ln(N_p(S)) = -m_p \ln(S) + C_p \quad (2.3)$$

Cette loi convient relativement bien pour la partie centrale d'une courbe S - N , mais moins pour les grands nombres de cycles. Le modèle de Strohmeyer [21] cherche à mieux décrire le comportement à grand nombre de cycles en décentrant la sévérité d'une valeur S_0 :

$$\ln(N_p(S)) = -m_p \ln(S - S_0) + C_p \quad (2.4)$$

Le modèle de Bastenaire [22] permet quant à lui de mieux capter la partie oligocyclique de la courbe S - N sous la forme :

$$N_p(S) = \frac{A_p}{S - S_0} \exp\left(-\left(\frac{S - S_0}{B_p}\right)^{m_p}\right) \quad (2.5)$$

2.3.4 Loi de cumul de Miner et chargements aléatoires

L'une des difficultés pour exploiter les courbes S - N est qu'elles font référence à des cycles identiques de chargement, alors que la plupart des chargements réels font intervenir des chargements de sévérité variable. Ainsi, la loi de cumul d'endommagement de Miner et Palmgren [23, 24] permet de prendre en compte un chargement, qui ne comporte pas un unique cycle de chargement répété à l'identique, mais des cycles de différentes sévérités notées $\underline{S} = (S_1, \dots, S_n)$ avec $n \in \mathbb{N}^*$ le nombre de cycles. On définit le dommage de Miner $D_n(\underline{S})$ comme suit :

$$D_n(\underline{S}) = \sum_{i=1}^n \frac{1}{N_f(S_i)} \quad (2.6)$$

Où les $N_f(S_i)$ sont les nombres de cycles à rupture pour des sévérités constantes S_i . La rupture est atteinte lorsque $D_n(\underline{S}) = 1$, plus formellement le critère définissant le nombre de cycles à rupture de Miner noté $N^M(\underline{S})$ est :

$$N^M(\underline{S}) = \inf \{n \in \mathbb{N}^*, D_n(\underline{S}) \geq 1\} \quad (2.7)$$

On peut bien sûr définir statistiquement le critère de dommage en introduisant les quantiles d'ordre p notés $N_p(S_i)$ pour une probabilité $p \in (0, 1)$ à la place des nombres de cycles à rupture $N_f(S_i)$ dans (2.6). Cette approche permet dans une certaine mesure de prendre en compte des cycles de chargement plus complexes que ceux testés pour les courbes $S-N$, cependant cela reste limité lorsque le chargement est aléatoire comme c'est souvent le cas en pratique (charge de vent, de houle etc.).

Différents modèles de fatigue ont donc été formulés dans un cadre complètement probabiliste [25, 19, 26, 27, 28, 29]. Ces modèles prennent non seulement en compte la variabilité associée au caractère aléatoire du chargement, mais également la variabilité associée au matériau, c'est-à-dire le fait que pour une même sévérité deux éprouvettes identiques cassent à des nombres de cycles différents. On peut également citer des travaux récents [30], qui en introduisant une notion nouvelle de *santé* de l'éprouvette permet de dériver, et d'identifier à partir des essais, un modèle de probabilité de survie d'une structure sous chargement complexe et aléatoire et en prenant en compte un aléa matériau. Un point intéressant est que la notion de santé est initialement aléatoire (la santé initiale de l'éprouvette est imparfaitement connue), mais évolue de manière déterministe, alors que le concept de dommage de Miner est initialement connu (souvent considéré nul) mais évolue de manière aléatoire, dans la mesure où les nombres de cycles à rupture qui sont exploités dans (2.6) sont aléatoires du fait de la variabilité matériau. L'intérêt de ce type de travaux est qu'ils permettent d'établir des expressions explicites pour la densité de probabilité de rupture en fatigue d'une structure soumise à un champ de contrainte hétérogène et aléatoire en se fondant sur les courbes $S-N$ pour alimenter l'identification probabiliste des paramètres du modèle.

2.3.5 Fatigue oligocyclique et lois de Paris

Cependant, assez rapidement dans l'étude de la fatigue des métaux, pour estimer le nombre de cycles à rupture d'une structure on a cherché à éviter de s'appuyer uniquement sur les courbes $S-N$, qui nécessitent un investissement expérimental important. Pour la fatigue oligocyclique, l'idée principale est d'identifier une loi de progression sous-critique des défauts. Les travaux précurseurs ayant conduit à la célèbre loi de Paris [8, 31] permettent de calculer l'évolution de la taille d'un défaut de taille initiale donné soumis à un chargement en mode I. Cette loi est principalement dédiée à la fatigue oligocyclique, alors qu'elle est peu prédictive pour la fatigue à grand nombre de cycles où les fissures de surface sont bloquées aux joints de grains [13]. L'accroissement de la taille du défaut est relié à la variation du facteur d'intensité de contrainte

$\Delta K_I(a)$ au cours du cycle (i.e., $\Delta K_I(a) = K_I^{\max}(a) - K_I^{\min}$) sous la forme d'une loi puissance :

$$da = \alpha (\Delta K_I(a))^\beta dN \quad (2.8)$$

Où l'on a noté da l'accroissement de la taille a du défaut, et où dN est l'accroissement du nombre de cycle, et α, β sont deux constantes positives. On utilise traditionnellement une écriture infinitésimale pour faire ensuite du calcul intégral bien que les cycles soient des entités discrètes.

La loi de Paris consiste donc d'abord à déterminer une taille critique de défaut noté a_c conduisant à la rupture fragile, qui s'obtient simplement en vérifiant $K_I^{\max}(a_c) = K_{Ic}$. Ensuite la loi de Paris (2.8) est exploitée pour compter le nombre de cycles $N_f(a_0, \Delta K_I)$ nécessaires pour passer d'une taille initiale de défaut notée a_0 à la taille a_c :

$$N_f(a_0, \Delta K_I) = \int_{a_0}^{a_c} \frac{da}{\alpha (\Delta K_I(a))^\beta} \quad (2.9)$$

Quoique très utile en pratique la loi de Paris reste limitée dans la mesure où elle repose sur un chargement purement cyclique alors que les chargements réels ne sont pas cycliques en général. Pour éviter de construire des pseudo-cycles, des lois alternatives à celle de Paris ont été formulées sous la forme d'une dérivée en temps dt au lieu d'une dérivée en cycle dN [32]. D'autres extensions de la loi de Paris ont été formulées [33] pour généraliser le recours au facteur d'intensité de contrainte dans la loi de Paris (2.8). Par ailleurs, la loi de Paris est exprimée en mode I car c'est le mode de rupture privilégié. Cependant pour des chargements mixtes I+II+III complexes, il est préférable de prendre en compte l'histoire du chargement qui influence significativement l'écoulement plastique à chaque cycle [34]. Un dispositif expérimental permettant de sollicitations en mode mixte [35] et des calculs cycliques aux éléments finis [36] ont permis de quantifier l'influence du trajet de chargement sur la durée de vie en fatigue.

2.3.6 Fatigue à grand nombre de cycles et modèle de Dang Van

Pour les cas d'adaptation et de pure élasticité, l'endurance peut être illimitée. La sévérité en-deçà de laquelle l'endurance est illimitée est appelée *limite d'endurance*. Il s'agit d'un paramètre important pour le dimensionnement des structures si l'on souhaite éviter les ruptures en fatigue. On sait que pour des chargements proches de la limite d'endurance la loi de Paris n'est pas appropriée dans la mesure où l'on est dans un régime de fatigue à grand nombre de cycles où la propagation des défauts est bloquée aux joint de grains. Un certain nombre de modèles sont donc dédiés à

identifier la limite d'endurance sur des bases théoriques différentes que celles de la loi de Paris. Un certain nombre d'approches de limite d'endurance considèrent les plans de cisaillement comme des plans privilégiés [37, 38, 39], ce qui est relativement pertinent dans la mesure où la fatigue à grand nombre de cycles tient à l'initiation de nouveaux défauts dans les grains et où les plans de cisaillement ont été identifiés comme des plans où s'amorcent les défauts [40]. Des critères énergétiques ont aussi été formulés pour mieux prendre en compte la caractère triaxial des contraintes [41].

Parmi les critères de limite d'endurance les plus utilisés et reconnus on trouve l'approche de Dang Van [42, 43, 44, 45, 46, 47], qui fait explicitement référence à l'échelle du polycristal. En effet, l'idée qui sous-tend ce critère est que la limite d'endurance est atteinte si les grains dont l'orientation cristalline est la plus défavorable vis-à-vis du chargement, c'est-à-dire dont le cisaillement sur l'un des plans de glissement cristallographique est le plus élevé, sont dans un régime d'adaptation. Sur le plan technique le critère de Dang Van repose sur une inclusion plastique plongée dans une matrice élastique en faisant l'hypothèse qu'on n'observe pas de déformation plastique à l'échelle macroscopique. Par ailleurs une homogénéisation de Lin-Taylor suppose l'égalité des déformations macroscopiques \mathbf{E} et mésoscopique $\boldsymbol{\varepsilon}$ (c'est-à-dire à l'échelle du polycristal). Cela permet d'obtenir la relation suivante entre la contrainte macroscopique $\boldsymbol{\Sigma}$ et mésoscopique $\boldsymbol{\sigma}$:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\Sigma} - \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^p \quad (2.10)$$

Où \mathbf{C} est le tenseur de raideur d'ordre 4 et $\boldsymbol{\varepsilon}^p$ le tenseur de déformation plastique mésoscopique. Sur cette base le critère de limite d'endurance est formulé :

$$\max_{\underline{n} \in \mathcal{O}} (\tau(\underline{n}) + a p(\underline{n})) < b \quad (2.11)$$

Où \mathcal{O} est l'ensemble des orientations possibles des plans de glissement, \underline{n} est le vecteur normal unitaire à un plan de glissement, $\tau(\underline{n}) = \sigma_{ns}$ est l'amplitude de la contrainte de cisaillement résolue (dans une direction de glissement notée \underline{s}) sur un plan de glissement de normale \underline{n} , $p(\underline{n}) = \sigma_{nn}$ est la contrainte de pression hydrostatique, et a, b sont des constantes caractérisant le matériau. Quoique le critère (2.11) repose sur une échelle mésoscopique, une hypothèse additionnelle permet de s'affranchir complètement de la connaissance de la microstructure. On suppose en effet, que l'ensemble des orientations cristallines \mathcal{O} contient toute les orientations de l'espace, c'est-à-dire $\mathcal{O} \simeq \mathbb{R}^3$. Ainsi la maximisation dans (2.11) se fait sur un ensemble qui ne prend en compte aucun détail de la microstructure. Cela revient en substance à

faire l'hypothèse : 1) que la texture cristallographique du matériau est isotrope (c'est-à-dire que la distribution des orientations cristallines recouvre toutes les directions de l'espace) et 2) que les champs de contrainte macroscopiques ont des gradients suffisamment faibles pour pouvoir considérer des volumes élémentaires représentatifs (VER) contenant suffisamment de grains pour qu'au moins l'un d'entre eux ait pour orientation cristalline la direction la plus défavorable de l'espace. Par ailleurs, on peut remarquer que [48] montre que les mécanismes envisagés pour expliquer les phénomènes de fatigue à l'échelle de la microstructure [15, 14] impliquent le critère de Dang Van, lui donnant ainsi une base micromécanique solide.

Le modèle de Dang Van présente quelques limites notables. En effet, si des calculs numériques prenant en compte les plans de glissement d'un certain nombre de grains soumis à un chargement uniforme confirment le modèle de Dang Van, l'application d'un gradient de contrainte (en introduisant une entaille semi-circulaire en surface qui concentre les contraintes) conduit en revanche à des écarts plus substantiels entre les prédictions numériques et le modèle de Dang Van [49, 48, 50]. On peut expliquer cet effet, par le fait qu'un gradient de contrainte important peut favoriser des écoulements plastiques dans les grains qui ne sont pas uniformes, mais qui peuvent au contraire se localiser sous forme de bandes de glissement, ce qui rend l'approche par homogénéisation de Lin-Taylor exploitée par le critère de Dang Van moins opérante.

Par ailleurs, un gradient de contrainte important sollicite davantage certains grains que d'autres, mais ces derniers ne sont pas nécessairement les plus mal orientés par rapport au chargement du point de vue cristallographique. Il existe donc un compromis entre la contrainte locale s'appliquant aux différents grains et l'orientation cristalline des ces derniers. Ainsi l'une des hypothèses majeures du critère de Dang Van, consistant à maximiser le critère (2.11) sur toutes les orientations de l'espace n'est pas vérifiée. On peut noter que cette limite est également rencontrée lorsque la texture cristallographique est très anisotrope, c'est-à-dire que certaines orientations cristallines sont très largement sur-représentées alors que d'autres sont presque absentes. C'est notamment le cas de certaines microstructures obtenues par fabrication additive métallique. Ces procédés consistent à former un bain de fusion (comme en soudure), et les gradients de température et les taux de refroidissement sont très élevés [51, 52] de sorte que l'on assiste à une cristallisation se formant majoritairement par épitaxie avec une compétition de croissance dendritique qui favorise très nettement les orientations cristallines alignées avec le gradient de température. La caractérisation en fatigue de ces structures particulière est un enjeu majeur des ces procédés [53, 54].

Enfin, si de très nombreux travaux exploitent le critère de Dang Van pour diverses applications d'ingénierie, ce dernier n'est formulé que pour obtenir la limite d'endurance, ce qui ne permet pas, lorsque l'on est dans un régime où la durée de vie est finie, de calculer la durée de vie en fatigue. Des travaux étendent donc le domaine de validité du critère de Dang Van pour permettre de prédire la durée de vie en fatigue [55] et de considérer des chargements multiaxiaux d'amplitude variable [56] où l'estimation de la déformation plastique cumulée est utilisée comme variable d'endommagement. On peut également mentionner des approches par homogénéisation similaire à celle de Dang Van mais permettant de considérer un accroissement permanent de la déformation plastique à l'échelle mésoscopique (c'est-à-dire celle des grains) alors que le critère de Dang Van est fondé sur l'idée d'adaptation où la déformation plastique n'évolue plus après un certain nombre de cycles [57].

2.3.7 Méthode directe cyclique de Maitournam

L'un des types d'approches ayant permis de calculer la réponse d'un polycrystal à un grand nombre de cycles dans un temps de calcul raisonnable est la *méthode directe cyclique* introduite par Habibou Maitournam [58, 59, 60]. Cette approche permet de calculer la réponse asymptotique d'un corps élasto-plastique sujet à un chargement cyclique. Sur cette base et en exploitant des calculs d'homogénéisation, Maitournam a également proposé un modèle multi-échelles pour prédire la durée de vie en fatigue à grand nombre de cycle [61]. Quoique très riche et utile en pratique, l'approche de Maitournam, comme pour le modèle de Dang Van, ne s'appuie ni sur la microstructure détaillée du polycrystal, ni sur des indicateurs statistiques de cette dernière. Les paramètres du modèle sont directement identifiés sur des courbes $S-N$.

2.4 Modèles de plasticité dans les polycristaux

2.4.1 Mise en évidence de l'influence de la microstructure

Comme nous l'avons déjà souligné, les approches précédentes pour simuler la fatigue à grand nombre de cycles, quoique fondées sur une bonne compréhension des mécanismes de plasticité cristalline ayant lieu dans l'arrangement polycristallin, ne dépendent pas explicitement de la microstructure détaillée, ni d'indicateurs statistiques de celle-ci.

Cependant, comme nous l'avons déjà évoqué, si la microstructure a peu d'influence sur les propriétés en fatigue oligocyclique, elle a en revanche, un rôle sur les propriétés

en fatigue à grand ou très grand nombre de cycles. Cela a été mis en évidence de manière expérimentale à travers diverses études. Par exemple l'influence de la taille des grains et notamment de la quantité de joints de grain a été observée [62]. En outre, puisque la forme, la taille et l'orientation cristalline des grains ont une influence sur le champ de contrainte local [63], ces paramètres doivent avoir une influence sur l'initiation et les premières étapes de propagation de micro-fissures. Ce lien entre la microstructure et les propriétés en fatigue a notamment été observé par des mesures au microscope optique [64] et par micro-tomographie au synchrotron [65, 66].

2.4.2 Plasticité cristalline

Pour appréhender la fatigue à grand nombre de cycles, il est donc utile de modéliser les écoulements plastiques au sein de la microstructure. À cette échelle, il est raisonnable de s'appuyer sur les lois de la plasticité cristalline, en considérant des champs de glissements sur des familles de plans cristallins. En effet, quoiqu'à l'échelle atomique les phénomènes plastiques ont pour origine le mouvement des dislocations (modélisées comme des lignes de défauts atomiques en tension), il serait illusoire du point de vue calculatoire de modéliser les écoulements plastiques sur un grand nombre de grains et pour un grand nombre de cycles en s'appuyant sur la dynamique des dislocations. En revanche, comme chaque grain composant le polycristal est défini comme une zone où l'orientation cristalline est assez homogène, on peut changer d'échelle, et considérer directement les glissements plan sur plan qui résultent du mouvement des dislocations. Les travaux pionniers de Orowan [67] ont permis de formuler des lois de comportement de plasticité cristalline complexes fondées théoriquement sur la dynamique des dislocations [68, 69]. Cependant nous ne développerons ici que la loi de Schmid formulée en 1935, qui est la plus répandue [70, 71, 72]. On considère M systèmes de glissement (qui dépendent de l'arrangement cristallin étudié : cubique face centré, cubique centré, hexagonal compact etc.), qui sont constitués d'un plan de glissement défini par son vecteur normal unitaire noté \underline{n}_s et d'une direction de glissement notée \underline{t}_s orthogonale à \underline{n}_s où $1 \leq s \leq M$ est l'indice d'un système de glissement. On considère que l'on peut activer un ou plusieurs systèmes de glissement particuliers en appliquant un cisaillement résolu selon $\underline{n}_s, \underline{t}_s$ noté τ_s que l'on peut simplement écrire sous la forme :

$$\tau_s = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{m}_s \quad (2.12)$$

Où $\boldsymbol{\sigma}$ (MPa) est le tenseur d'ordre 2 des contraintes de Cauchy et où l'on a posé :

$$\mathbf{m}_s = \frac{1}{2} (\underline{n}_s \otimes \underline{t}_s + \underline{t}_s \otimes \underline{n}_s) \quad (2.13)$$

La déformation totale se lit en petites transformation comme la partie symétrique du gradient du champ de déplacement noté \underline{u} , ce qui se lit :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\nabla \underline{u} + {}^T \nabla \underline{u}) \quad (2.14)$$

Dans l'hypothèse des petites transformations, cette déformation totale se divise additivement en deux termes, le premier étant la déformation plastique notée $\boldsymbol{\varepsilon}^p$ et le second étant la déformation élastique notée $\boldsymbol{\varepsilon}^e$, permettant de rendre l'ensemble compatible c'est-à-dire pouvant s'écrire comme une déformation totale dérivant d'un champ de déplacement. On a donc :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^p + \boldsymbol{\varepsilon}^e \quad (2.15)$$

Pour la partie élastique on introduit le tenseur de raideur d'ordre 4 \mathbf{C} , dont les symétries correspondent à l'arrangement cristallin, tel que :

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^e \quad (2.16)$$

Où le tenseur de contrainte de Cauchy vérifie l'équilibre, c'est-à-dire :

$$\operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) = 0 \quad (2.17)$$

Puisque l'écoulement plastique se fait selon les systèmes de glissement considérés on a :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = \sum_{s=1}^M \dot{\gamma}_s^p \mathbf{m}_s \quad (2.18)$$

Où l'on a introduit γ_s^p le champ de glissement selon le s -ième système de glissement (avec $1 \leq s \leq M$). Sur cette base on peut déterminer les taux glissements plastiques $\dot{\gamma}_s^p$ de manière incrémentale en introduisant un critère de plasticité. Dans sa version la plus simple, le critère de Schmid se lit pour chaque système de glissement s [73] :

$$\left\{ \begin{array}{l} |\tau_s - x_s| - \tau_C \leq 0 \\ \dot{\gamma}_s^p (|\tau_s - x_s| - \tau_C) = 0 \\ \dot{\gamma}_s^p = |\dot{\gamma}_s^p| \frac{\tau_s - x_s}{\tau_C} \end{array} \right. \quad (2.19)$$

Où l'on a introduit $\tau_C > 0$ (MPa) une contrainte critique de glissement et x_s (MPa) une contrainte d'écrouissage cinématique. Ainsi le critère de Schmid consiste à borner l'intensité du cisaillement centré en x_s selon les systèmes de glissement par une valeur critique τ_C . La seconde équation de (2.19) impose que si $|\tau_s - x_s| < \tau_C$ alors il n'y a

pas d'évolution du champ de glissement plastique, c'est-à-dire $\dot{\gamma}_s^p = 0$ et si $|\tau_s - x_s| = \tau_C$ alors on peut avoir une évolution du glissement plastique. Évidemment une loi d'écoulement vient compléter ce système avec la troisième équation de (2.19), qui impose que le glissement se fasse dans le sens du cisaillement résolu centré en x_s . (En fait la troisième équation de (2.19) est simplement équivalente à l'égalité : $\text{sign}(\dot{\gamma}_s^p) = \text{sign}(\tau_s - x_s)$). La loi d'écrouissage du cristal permet de fixer une relation d'évolution de τ_C et x_s . On pose donc une relation entre $\dot{\tau}^C, \dot{x}_s$ et les $\dot{\gamma}_s^p$ sur tous les systèmes de glissement. On peut noter qu'il existe des versions visco-plastiques de ce type de critère [74, 75], qui ont été appliquées au calcul polycristallin [76, 77].

2.4.3 Aspects énergétiques de la plasticité

Dans la majorité des cas, on détermine le glissement plastique γ_s^p sur les différents systèmes de glissements $1 \leq s \leq S$ en résolvant les équations précédentes avec les conditions aux limites par éléments finis, c'est-à-dire en discrétisant une formulation faible sur un maillage. Du fait de la plasticité, le système est fortement non-linéaire, ce qui implique d'appliquer le chargement par incréments. Cependant il convient de constater qu'en réécrivant l'équilibre (2.17) sur les déplacements on obtient l'équation de Navier qui fait intervenir la déformation plastique au second membre :

$$\frac{1}{2} \text{div} (\mathbf{C} : (\nabla \underline{u} + {}^T \nabla \underline{u})) = \text{div} (\mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^p) \quad (2.20)$$

Ainsi si les histoires des glissements plastiques γ_s^p sont connus, le problème devient parfaitement linéaire et simple à calculer. Cela revient à dire que la non-linéarité se limite à la détermination de l'histoire de la déformation plastique. À cette remarque s'ajoute le fait que les phénomènes plastiques ne dépendent pas du temps physique, mais d'un temps chronologique, c'est-à-dire que la réponse du matériau dépend de l'histoire de la déformation, mais pas de la vitesse de déformation, ce qui n'est pas le cas pour la visco-plasticité par exemple qui fait intervenir une loi puissance dans la loi d'écoulement (i.e., 3-ième équation de (2.19)). Dans ce cadre on a pu montrer l'équivalence des équations vues précédemment et la minimisation de l'énergie totale, composé de l'énergie potentielle notée $\Phi [\gamma_1^p, \dots, \gamma_S^p]$ (i.e., énergie élastique moins le potentiel des efforts extérieurs) et de l'énergie dissipée notée $\mathcal{D} [\gamma_1^p, \dots, \gamma_S^p]$ dans les phénomènes plastiques [78, 79]. La détermination des glissements plastiques s'écrit donc :

$$(\gamma_1^p, \dots, \gamma_S^p) = \underset{(\gamma_1^*, \dots, \gamma_S^*) \in \mathbb{R}^S}{\text{argmin}} (\Phi [\gamma_1^p, \dots, \gamma_S^p] + \mathcal{D} [\gamma_1^p, \dots, \gamma_S^p]) \quad (2.21)$$

On remarque que pour chaque itération dans la minimisation (2.21), on doit calculer l'énergie potentielle pour un état de glissement plastique connu, ce qui nécessite de résoudre l'équation de Navier (2.20) puisque dans l'absence de l'écroutissage cinématique on a :

$$\Phi [\gamma_1^p, \dots, \gamma_S^p] = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^p) : \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^p) \, d\Omega - \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{n}) \cdot \underline{u} \, dS \quad (2.22)$$

Avec Ω le volume du cristal considéré et $\partial\Omega$ sa frontière. Le premier terme correspond à l'énergie élastique stockée par la déformation du cristal, et le second terme est le potentiel des efforts extérieurs. Ainsi comme nous l'avons remarqué plus haut, ce calcul est relativement aisé dans la mesure où dans le cas de glissements plastiques connus, les équations sont linéaires. Par ailleurs, pour le cas du modèle de plasticité cristalline que nous avons décrit plus haut, l'énergie dissipée dans un glissement plastique γ_s^* s'écrit simplement :

$$\mathcal{D} = \int_{\Omega} \int_0^{|\gamma_s^*|} \tau_C \, d\gamma \, d\Omega \quad (2.23)$$

Cette approche énergétique a notamment été utilisée pour diverses applications, par exemple [80, 81].

2.4.4 Modèles en champs complets à l'échelle du polycristal

Parmi les premiers travaux se concentrant sur l'apport de la plasticité cristalline pour prédire la durée de vie en fatigue on trouve des modèles micromécaniques où les plans de glissement d'un grain dans une matrice sont étudiés [82]. Le développement des capacités de calcul a ensuite permis de réaliser des calculs complets à l'échelle du polycristal. Par exemple, des calculs aux éléments finis ont été réalisés sous chargement cyclique sur une microstructure 2D, composée d'une grille de grains carrés identiques, dont chacun est représenté par un unique élément de maillage [83]. Des orientations cristallines variées ont été testées pour estimer la variabilité matériau des phénomènes de fatigue à grand nombre de cycles. Une représentation plus réaliste des grains en 2D est utilisée dans [84] mais seuls quelques cycles de chargement ont pu être calculés.

D'autres calculs à l'échelle des agrégats polycristallins ont été menés par éléments finis [50, 85, 86, 87]. Quelques centaines de grains ont pu être modélisés en champ complet, c'est-à-dire sans hypothèse d'uniformité des déformations plastiques dans les grains. Pour des calculs 2D contenant 2000 grains, on a pu calculer jusqu'à 10^6 cycles de chargement. Mais le temps de calcul est tel qu'il est difficile d'explorer différentes microstructures et étudier la dispersion statistique inhérente à la fatigue

à grand nombre de cycles [88]. Cependant ces aspects probabilistes ont été étudié [86] sur la base de ce type de calculs en champ complet. Mais il faut noter que la probabilité de rupture à N_f cycles (avec un unique N_f fixé) n'a été identifiée que sur relativement peu de données puisque quelques microstructures seulement ont pu être calculées. Si ce type d'approche montre qu'il est théoriquement possible d'exploiter la méthode des éléments finis en champ complet à l'échelle *mésoscopique* (c'est-à-dire à l'échelle du polycristal) pour explorer statistiquement les phénomènes de fatigue à grand nombre de cycles, il est clair que la problématique du temps de calcul est très limitante, même en disposant de capacités de calcul modernes.

2.4.5 Modèles d'inclusion

Puisque les calculs numériques en champs complets sont chers du point de vue du temps de calcul, on peut tenter de revenir aux fondamentaux des méthodes apparentées au critère de Dang Van, qui reposent sur une homogénéisation d'une inclusion ellipsoïdale dans une matrice infinie. Le problème général d'une inclusion soumise à une déformation libre imposée est fondateur et a été traité en détails par Eshelby puis Mura [89, 90]. Une solution analytique très classique du problème d'inclusion a été établie et pourrait servir de base pour quantifier à l'échelle mésoscopique, avec un coût très faible, les champs de déformation plastique dans chaque grain. Cependant cette solution souffre de quelques limitations, en effet 1) elle n'est valable que pour les comportements élastiques aussi bien pour l'inclusion que pour la matrice, 2) une unique inclusion est considérée, 3) la matrice est supposée infinie et 4) la déformation libre dans l'inclusion est uniforme. La première limite est facilement levée dans la mesure où l'on a vu que l'on pouvait exprimer le problème élasto-plastique sous forme énergétique, et ainsi considérer la déformation plastique dans l'inclusion comme une déformation imposée, que l'on détermine par optimisation de l'énergie totale. Cette optimisation peut se faire analytiquement ce qui n'ajoute donc rien au temps de calcul. La seconde limitation est plus problématique dans la mesure où la durée de vie en fatigue implique en général plusieurs grains autour d'un grain particulièrement sollicité (grain critique) [86]. Le fait que plusieurs grains plastifient crée une interaction entre eux dont il faut tenir compte. En général l'interaction entre différentes inclusions est estimée par la méthode de l'inclusion équivalente [91, 91, 92, 93, 94, 95]. La troisième limitation pose notamment problème près de la frontière du domaine où les contraintes peuvent se concentrer par des effets de bord où près d'amorces de fissure en surface. Des approches en 2D étendent le résultat d'Eshelby près d'une surface

libre en considérant un domaine semi-infini avec des conditions aux limites de Dirichlet ou de Neumann[96]. Ainsi, la distance et l'orientation relative de l'inclusion par rapport au bord sont des paramètres additionnel vis-à-vis de la solution d'Eshelby classique. Enfin la dernière limite interdit d'estimer l'effet des bandes de glissement au sein d'un grain, car la déformation plastique y est supposée uniforme à la manière des méthodes par champ moyen.

On voit donc que l'idée d'utiliser des solutions du type inclusion d'Eshelby pour traiter le problème mésoscopique rapidement sans passer par une discrétisation numérique coûteuse (éléments finis ou par transformée de Fourier rapide) se heurte certes à des difficultés, mais pour lesquelles on a des pistes de développement. Les travaux de cette thèse s'inscrivent dans l'idée générale, d'étendre et d'exploiter des solutions analytiques de type Eshelby pour estimer le plus rapidement possible le champ de déformation plastique dans un polycristal afin d'établir des critères de fatigue qui dépendent de l'arrangement local des grains. Ceci permettra notamment de traiter de grands nombres de cycles pour de nombreux polycristaux afin d'en tirer les statistiques macroscopiques dans le même esprit que des méthodes de changement d'échelles proposées pour la croissance de grain [97, 98, 99, 100]. Cela permettra de quantifier la probabilité de rupture à N_f cycles.

2.5 Résumé et choix du régime de fatigue étudié

En introduction, nous avons posé la problématique de ces travaux de thèse, dont l'enjeu majeur est de proposer un outil permettant de comprendre et calculer la variabilité matériau dans un régime de fatigue à grand nombre de cycles. Comme nous l'avons dit, cette variabilité trouve deux origines, la première est le caractère aléatoire du chargement futur imposé à la structure, et la seconde est la variabilité intrinsèque associée au matériau. Un certain nombre de travaux offrent déjà des outils très opérants pour caractériser la probabilité de survie d'une structure. Cependant l'une des principales entrées de ce type de formulation probabiliste [30] tient à la caractérisation de l'aléa associé au matériau (c'est-à-dire la santé initiale), qui est traité comme une donnée dans le modèle. C'est donc ce dernier aspect qu'on se propose d'approfondir dans ces travaux de thèse. Dans l'esprit de [30] cet aléa est caractérisé expérimentalement via des courbes $S-N$, par exemple sous la forme d'une loi de Weibull (bien que l'article présente aussi les résultats généraux et ne se limite pas à une loi de Weibull). Cependant, cela pose de grandes difficultés pour la fatigue à grand nombre de cycles, du fait du temps d'expérimentation et du nombre d'éprouvettes

nécessaires. On se propose donc d'explorer une approche moins empirique qui se fonde davantage sur les mécanismes physiques à l'échelle de la microstructure.

Pour les chargements importants (conduisant à une fatigue oligocyclique), la variabilité associée au matériau est principalement due au fait que la taille des défauts de surface (i.e., amorces de fissures etc.) est aléatoire et suit une distribution statistique, qui dépend du procédé de fabrication, des traitements de surface (i.e., polissage) etc. En revanche pour les chargements peu intenses (conduisant à une fatigue à grand nombre de cycles), la propagation des micro-fissures ou des porosités est bloquée par les joints de grains, ce qui rend les lois de type Paris peu prédictives [13]. D'autres mécanismes prennent donc le relais et impliquent notamment la plasticité cristalline. Ainsi un autre facteur significatif d'aléa tient à la microstructure du matériau, qui n'est en général pas connue en détails, mais au mieux de manière statistique. En effet, à l'échelle du polycristal la déformation plastique est hétérogène et dépend fortement de l'orientation cristalline des grains. Certains grains sont soumis à des déformations plastiques beaucoup plus importantes que d'autres grains selon le rapport entre leur orientation cristalline et la direction du chargement, ce qui peut amorcer des défauts pouvant ensuite s'accroître jusqu'à la rupture de la structure.

Dans ce travail de thèse, on fait donc le choix de s'attacher davantage à explorer l'influence de la microstructure sur les phénomènes de plasticité et de fatigue que l'effet de la taille des défauts de surface. Ce choix est dû au fait qu'un certain nombre d'outils efficaces comme la loi de Paris et ses extensions permettent d'estimer l'accroissement sous-critique d'un défaut de type fissure pour chaque cycle de chargement en fatigue oligocyclique. On peut donc dimensionner une structure de manière probabiliste, en considérant une distribution réaliste des défauts de surface en fonction du procédé de fabrication de la pièce. En revanche, comme nous l'avons vu, en fatigue à grand ou très grand nombre de cycles, les aspects probabilistes liés à la méconnaissance de la microstructure détaillée, posent des difficultés qui restent très contraignantes. En effet, le poids calculatoire des modèles de la littérature interdit leur utilisation intensive sur un grand nombre de cycles. Dans le cadre de ces travaux de thèse nous concentrons notre analyse sur des volumes élémentaires représentatifs (VER) dans la masse du matériaux. Cependant des travaux futurs pourraient permettre d'étendre la méthodologie proposée près des frontières du domaine.

2.6 Plan de la thèse

La thèse est présentée de manière progressive en s'articulant autour des chapitres 3 à 5 dans lesquels un modèle mésoscopique rapide de plasticité cristalline est développé. Plus précisément, le chapitre 3 revient sur la solution d'Eshelby et montre comment exploiter une minimisation énergétique pour dériver une solution analytique dans le cas d'une inclusion en plasticité cristalline avec écrouissage linéaire dans une matrice infinie soumise à des chargements quelconques cycliques.

Le chapitre 4 est une présentation beaucoup plus générale et adaptée au problème des polycristaux, dans la mesure où l'on ne fait plus l'hypothèse d'une inclusion, mais où l'on considère directement le polycristal comme un assemblage de domaines quelconques interagissant les uns avec les autres. Le résultat de la minimisation est donc exact dans la mesure où aucune hypothèse supplémentaire n'est introduite pour mener à bien ces développements. Cependant nous montrerons que la solution obtenue n'est pas calculable rapidement en pratique, et l'on introduira la notion d'interaction faible entre les grains pour exploiter certains résultats pratiques des inclusions d'Eshelby. L'hypothèse d'interaction faible que nous proposons apparaît comme une linéarisation du résultat général. Ceci permet des temps de calculs très réduits compatibles avec des études où l'on simule directement un grand nombre de cycles (c'est-à-dire $\geq 10^6$) sur un grand nombre de VER. Le domaine de validité de cette approche est étudié en comparant les résultats obtenus avec des calculs aux éléments finis incluant la plasticité cristalline.

Puisque l'on a supposé, dans les chapitres précédents, un écrouissage linéaire sans seuil, chaque grain peut toujours écrouir jusqu'à ce que le cisaillement résolu sur son plan de glissement actif soit plus faible que sa contrainte d'écoulement (c'est-à-dire son cisaillement critique). Ainsi, on ne peut modéliser que les cas d'adaptation, dans la mesure où tous les grains du VER finissent toujours par avoir un comportement parfaitement élastique. L'objet du chapitre 5 est de déterminer directement le glissement plastique et le glissement plastique cumulé stabilisés (c'est-à-dire lorsque ces variables cessent d'évoluer) en fonction des paramètres du chargement et de la microstructure sans calculer aucun des cycles de chargement explicitement. Cette approche est dédiée aux cas d'adaptation et présente l'intérêt d'être quasi instantanée et d'inclure tous les paramètres de la microstructure détaillée. Nous complétons ces solutions analytiques directes par un critère de Manson-Coffin pour estimer la durée de vie en fatigue, et nous réalisons des études de sensibilité aux différents paramètres de chargement et microstructuraux.

Le chapitre 6 permet d'étendre le modèle mésoscopique à interaction faible que nous avons proposé en considérant une loi d'érouissage plus complexe. En effet, comme nous l'avons dit un simple érouissage linéaire sans seuil ne permet pas de bien modéliser les phénomènes de fatigue autres que les cas d'adaptation. Nous considérons donc un érouissage non-linéaire établi à partir de relations entre la densité de dislocations et le glissement plastique cumulé, qui permet de prendre en compte l'influence de la taille des grains sur la loi d'érouissage de chacun d'entre eux (c'est-à-dire l'effet Hall-Petch). Par ailleurs, après un plateau quasi horizontal, une phase d'adoucissement linéaire est ajoutée à la fin de la courbe d'érouissage pour modéliser l'endommagement rapide de la structure lorsque le matériau est suffisamment éroui. Cette courbe d'érouissage à trois phases modifie les solutions analytiques dans leurs détails mais pas dans leur structure, et les temps de calculs restent très faibles pour calculer chaque cycle de chargement. Par ailleurs, pour estimer la durée de vie en fatigue nous introduisons des critères de rupture différents (c'est-à-dire loi de Basquin, de Manson-Coffin ou par adoucissement) selon les différents régimes d'érouissage. L'influence sur la durée de vie en fatigue des paramètres microstructuraux (taille des grains, textures morphologique et cristallographique, gradient de contrainte en jouant sur le nombre de grains dans le VER etc.) est ensuite explorée. Des courbes $S-N$ probabilistes sont ensuite produites sur la base du modèle proposé, ainsi que la densité probabilité de rupture à N_f cycles.

Dans le chapitre 7 on s'intéresse à un cas d'application pratique de la méthodologie proposée. La fatigue des stents dans le domaine biomédical est étudiée car il s'agit de structures de taille réduite soumises à de très nombreux chargements cycliques (battements cardiaques) où la microstructure est connue pour jouer un rôle significatif. Nous avons pu retrouver cette observation empirique par le calcul.

Nous tirons les conclusions de ce travail et dressons quelques perspectives pour des travaux futurs dans le chapitre 8.

Chapitre 3

Modèle mésoscopique rapide pour une inclusion type Eshelby

Sommaire

3.1	Introduction	26
3.2	Plasticité cristalline dans une inclusion type Eshelby	27
3.3	Modèle mésoscopique pour une inclusion type Eshelby	28
3.3.1	Stratégie du modèle mésoscopique	28
3.3.2	Approche énergétique	29
3.3.3	Minimisation de l'énergie incrémentale	34
3.4	Mise en oeuvre	35
3.4.1	Approximation des grains en ellipsoïdes	35
3.4.2	Détermination du système de glissement activé	37
3.5	Domaine de validité du modèle mésoscopique	38
3.5.1	Construction du modèle éléments finis	38
3.5.2	Résultats et discussions	40
3.6	Conclusion	45

3.1 Introduction

Ce chapitre introduit les bases d'une méthode mésoscopique rapide pour le cas modèle d'un grain élasto-plastique plongé dans une matrice élastique. En supposant un tenseur d'élasticité isotrope, la situation étudiée correspond à celle d'un polycristal où la plasticité est confinée à un seul grain. La méthode proposée repose sur la minimisation de l'énergie incrémentale composée de l'énergie potentielle élastique et de l'énergie dissipée par glissement plastique. Sous certaines hypothèses simplificatrices, on parvient à obtenir des expressions explicites pour l'incrément de glissement plastique (et pour l'incrément de glissement cumulé) résultant d'un incrément de

chargement. Cette approche énergétique évite le passage par un calcul éléments finis (EF) en plasticité cristalline. La dernière section de ce chapitre est consacrée à la validation du modèle mésoscopique présentés via une comparaison avec un modèle de plasticité cristalline en EF sur *Freefem++*. L'influence des différents paramètres (taille et forme du cristal, amplitude du chargement macroscopique) sur l'erreur relative calculée entre les deux modèles est étudiée.

3.2 Plasticité cristalline dans une inclusion type Eshelby

Un cristal est un matériau solide qui possède une structure périodique et régulière formée par l'organisation ordonnée de ses atomes, ions ou molécules dans l'espace et qui est illustrée à la figure 3.1. On peut distinguer les monocristaux des polycristaux, qui sont formés par l'agrégation de plusieurs grains cristallins d'orientations différentes et qui seront étudiés plus en détails dans le chapitre suivant. Les cristaux ont souvent des propriétés exceptionnelles telles que la dureté, la résistance à la fracture et la conductivité thermique et électrique et constituent de nombreux matériaux naturels et synthétiques.

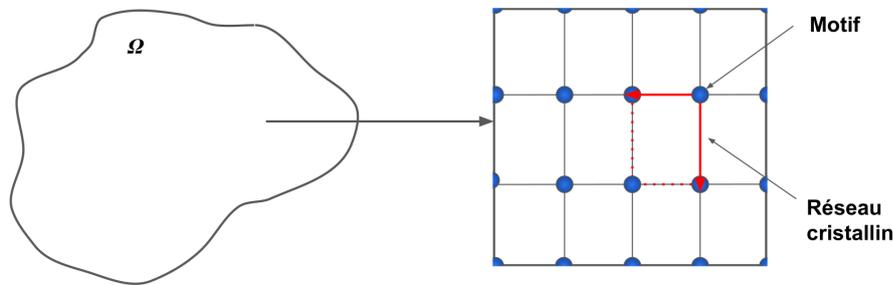


FIGURE 3.1 – Structure cristalline

Il y a plusieurs manières d'organiser spatialement les atomes, ions ou molécules dans un cristal, cette organisation spatiale est appelée réseau cristallin. Les exemples des réseaux cristallins les plus communs sont détaillés ci-dessous :

- (a) Le réseau cubique simple, dans lequel les atomes sont disposés de manière régulière à l'intérieur d'une structure cubique avec un atome au centre de chaque coin du cube.
- (b) Le réseau cubique centré, similaire au réseau cubique simple avec de plus un atome au centre de chaque cube.

- (c) Le réseau cubique à faces centrées (CFC), où les atomes sont disposés de manière régulière à l'intérieur d'une structure cubique avec un atome au centre de chaque face et un atome aux coins du cube.
- (d) Le réseau hexagonal compact, où les atomes sont disposés de manière régulière à l'intérieur d'une structure hexagonale compacte (Sur chaque sommet et au centre des bases de l'hexagone).
- (e) Le réseau tétraédrique, avec des atomes disposés de manière régulière à l'intérieur.

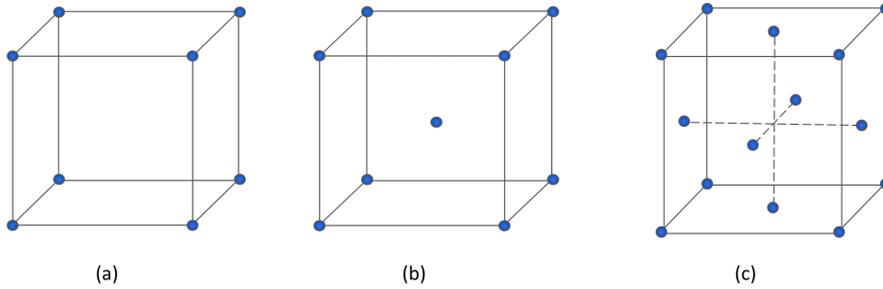


FIGURE 3.2 – Réseaux cristallins usuels

Il y a aussi d'autres réseaux cristallins tels que le réseau orthorhombique, le réseau monoclinique et le réseau triclinique, chacun ayant ses propres caractéristiques et pouvant être lié à certaines propriétés physiques.

La plasticité cristalline désigne la capacité d'un cristal à être déformé de manière permanente sous l'effet d'une force extérieure. Cela se produit lorsque la contrainte exercée sur le cristal dépasse une certaine limite appelée limite élastique τ_0 . Lorsque cette limite est dépassée, le cristal subit une déformation plastique ε^p irréversible et change de forme de manière permanente, même lorsque la force est relâchée.

3.3 Modèle mésoscopique pour une inclusion type Eshelby

3.3.1 Stratégie du modèle mésoscopique

Considérons un grain I (pour inclusion) élasto-plastique occupant un domaine Ω_I inclus dans un domaine Ω supposé infini partageant les mêmes propriétés élastiques que le grain et soumis à un chargement macroscopique σ . Dans le but de calculer les glissements plastiques cumulés sur un grand nombre de cycles avec un temps de calcul raisonnable, nous adoptons les hypothèses simplificatrices suivantes :

Première hypothèse : S'intéresser aux niveaux de chargement faible (fatigue polycyclique ou à grand nombre de cycle), conduisant à une réponse globalement et macroscopiquement élastique.

Deuxième hypothèse : Négliger l'anisotropie du tenseur de raideur \mathbf{C} .

Troisième hypothèse : Supposer qu'un seul système de glissement est activé dans le grain.

Comme un bon nombre de métaux sont associés à une structure cristalline cubique à faces centrées (CFC) (cf. figure 3.2.c), il est considéré dans le reste de l'étude que le matériau étudié est un CFC. Pour ce réseau cristallin, on obtient en toute rigueur un tenseur de raideur non-isotrope, dont la déviation par rapport à la situation isotrope est suffisamment faible pour être négligée, justifiant ainsi la deuxième hypothèse et assurant que la réponse est élastique et homogène.

3.3.2 Approche énergétique

Le bilan énergétique du grain est constitué de l'énergie potentielle élastique Φ que stocke le grain pendant sa déformation ainsi que l'énergie de dissipation \mathcal{D} nécessaire pour assurer le glissement plastique.

Le grain I est modélisé dans la suite, dans le cadre de la plasticité cristalline en petites transformations, en considérant M systèmes de glissement $(\underline{n}_i, \underline{t}_i)_{1 \leq i \leq M}$ où \underline{n}_i est la normal du plan de glissement et \underline{t}_i la direction de glissement. La déformation libre $\boldsymbol{\varepsilon}^p$ à imposer dans le grain I s'écrit :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^p = \sum_{i=1}^M \gamma_i^p \mathbf{m}_i \quad (3.1)$$

où γ_i^p est le glissement pour le système i et \mathbf{m}_i est le cisaillement résolu :

$$\mathbf{m}_i = \frac{1}{2}(\underline{n}_i \otimes \underline{t}_i + \underline{t}_i \otimes \underline{n}_i) \quad (3.2)$$

Sous l'hypothèse 3 (dans la section 3.3.1) où un seul système de glissement s (avec $1 \leq s \leq M$) est activé, l'expression (3.1) se réduit à :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^p = \gamma^p \mathbf{m}_s \quad (3.3)$$

On considère dans la suite un chargement cyclique, en supposant que le chargement appliqué varie de façon monotone sur chaque demi-cycle. Le glissement plastique à la fin du demi-cycle j s'écrit :

$$\gamma^{p,j} = \Delta\gamma^p + \gamma^{p,j-1} \quad (3.4)$$

où $\Delta\gamma^p$ est l'incrément du glissement plastique sur le demi-cycle j et $\gamma^{p,j-1}$ est le glissement plastique à la fin du demi-cycle $j-1$. La connaissance de $\Delta\gamma^p$ pour tout j permet de déterminer la déformation plastique cumulée en fonction des cycles et d'estimer la durée de vie en fatigue.

3.3.2.1 Énergie potentielle élastique

Dans les développements à suivre, il sera commode de considérer une déformation libre virtuelle notée $\boldsymbol{\varepsilon}^*$ définie de façon similaire à (3.3) par :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^* = (\Delta\gamma^* + \gamma^{p,j-1})\mathbf{m}_s \quad (3.5)$$

Où $\Delta\gamma^*$ est un incrément de glissement plastique virtuel. Nous supposons que la densité volumique d'énergie élastique dans le grain I est donnée par :

$$w = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^*) : \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^*) + \frac{1}{2}\mathbf{X} : \boldsymbol{\varepsilon}^* \quad (3.6)$$

avec $\boldsymbol{\varepsilon}$ la déformation totale, $\boldsymbol{\varepsilon}^*$ la déformation libre (supposée uniforme dans le grain I), et \mathbf{C} le tenseur d'élasticité (supposé isotrope selon la seconde hypothèse introduit dans la section 3.3.1). Le terme \mathbf{X} est le centre du domaine élastique et vérifie :

$$\mathbf{X}(\boldsymbol{\varepsilon}^*) = \xi_X \boldsymbol{\varepsilon}^* \quad (3.7)$$

Où ξ_X est un paramètre homogène à une contrainte. Cette relation modélise un écrouissage cinématique linéaire. En se plaçant à la fin du j -ème demi-cycle de chargement, l'énergie potentielle élastique Φ du système s'écrit

$$\Phi = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^*) : \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^*) d\Omega - \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{\sigma}^j \cdot \underline{n}) \cdot \underline{u} dS + \frac{1}{2} \int_{\Omega_I} \mathbf{X} : \boldsymbol{\varepsilon}^* d\Omega \quad (3.8)$$

Où $\boldsymbol{\sigma}^j$ est le chargement macroscopique, le champ de déplacement \underline{u} et le champ de déformation correspondant $\boldsymbol{\varepsilon}$ sont solutions du problème d'élasticité suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^*) \text{ dans } \Omega_I, \\ \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} \text{ dans } \Omega/\Omega_I, \\ \text{div}(\boldsymbol{\sigma}) = 0 \text{ dans } \Omega \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{n} = \boldsymbol{\sigma}^j \cdot \underline{n} \text{ sur } \partial\Omega \\ \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\nabla\underline{u} + {}^T\nabla\underline{u}) \text{ dans } \Omega, \end{array} \right. \quad (3.9)$$

Les développements exposés dans la suite visent à réécrire Φ comme une fonction explicite de $\boldsymbol{\sigma}^j$ et $\boldsymbol{\varepsilon}^*$. Soit χ la fonction caractéristique de Ω_I définie par $\chi(\underline{x}) = 1$ si $\underline{x} \in \Omega_I$ and $\chi(\underline{x}) = 0$ sinon. On considère le champ tensoriel (d'ordre deux) suivant :

$$\boldsymbol{\tau}(\underline{x}) = \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\sigma}^j + \chi(\underline{x}) \boldsymbol{\varepsilon}^* \quad (3.10)$$

En observant que $\int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{n}) \cdot \underline{u} dS = \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon} d\Omega$ l'énergie potentielle élastique peut être réécrite comme suit :

$$\Phi = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} d\Omega - \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\tau} d\Omega + \frac{1}{2} |\Omega_I| \boldsymbol{\varepsilon}^* : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^* + \frac{1}{2} \int_{\Omega_I} \mathbf{X} : \boldsymbol{\varepsilon}^* d\Omega \quad (3.11)$$

Pour une déformation libre $\boldsymbol{\varepsilon}^*$ donnée, il est bien connu que la solution \underline{u} au problème d'élasticité (3.9) minimise l'énergie potentielle (3.11) parmi tous les champs de déplacement cinématiquement admissibles. Cela implique la relation :

$$\int_{\Omega_I} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}' d\Omega = \int_{\Omega} \boldsymbol{\tau} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}' d\Omega \quad (3.12)$$

pour tout champ de déformation $\boldsymbol{\varepsilon}'$ correspondant à un déplacement cinématiquement admissible. En choisissant la déformation uniforme $\boldsymbol{\varepsilon}' = \int_{\Omega} (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\tau}) d\Omega$ dans (3.12), on obtient :

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon} d\Omega = |\Omega| \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\sigma}^j + |\Omega_I| \boldsymbol{\varepsilon}^* \quad (3.13)$$

Par conséquent, la valeur moyenne de la déformation élastique $\boldsymbol{\varepsilon}$ est égale à :

$$\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon} d\Omega = \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\sigma}^j + c \boldsymbol{\varepsilon}^* \quad (3.14)$$

Où $c = |\Omega_I|/|\Omega|$ est la fraction volumique du grain I .

En réutilisant (3.12) avec $\boldsymbol{\varepsilon}' = \boldsymbol{\varepsilon}$, on obtient :

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} d\Omega = \int_{\Omega} \boldsymbol{\tau} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} d\Omega \quad (3.15)$$

Ainsi, en remplaçant dans (3.11), on trouve :

$$\Phi = -\frac{1}{2} \int_{\Omega} \boldsymbol{\tau} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} d\Omega + \frac{1}{2} |\Omega_I| \boldsymbol{\varepsilon}^* : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^* + \frac{1}{2} \int_{\Omega_I} \mathbf{X} : \boldsymbol{\varepsilon}^* d\Omega \quad (3.16)$$

La première intégrale dans (3.16) peut être exprimée sous forme d'une fonction linéaire du chargement macroscopique $\boldsymbol{\sigma}^j$ et de la déformation libre $\boldsymbol{\varepsilon}^*$. En effet, en utilisant la définition (3.10) de $\boldsymbol{\tau}$ et la relation (3.13), on obtient :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \boldsymbol{\tau} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} d\Omega &= \boldsymbol{\sigma}^j : \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon} d\Omega + \boldsymbol{\varepsilon}^* : \mathbf{C} : \left(\int_{\Omega_I} \boldsymbol{\varepsilon} d\Omega \right) \\ &= |\Omega| \boldsymbol{\sigma}^j : \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\sigma}^j + |\Omega_I| \boldsymbol{\sigma}^j : \boldsymbol{\varepsilon}^* + \boldsymbol{\varepsilon}^* : \mathbf{C} : \left(\int_{\Omega_I} \boldsymbol{\varepsilon} d\Omega \right) \end{aligned} \quad (3.17)$$

Considérons $\boldsymbol{\varepsilon}_I$ la solution du problème avec des conditions aux limites libres suivant :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon}_I - \boldsymbol{\varepsilon}^*) \text{ dans } \Omega_I \\ \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_I \text{ dans } \Omega/\Omega_I \\ \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) = 0 \text{ dans } \Omega \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{n} = 0 \text{ sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (3.18)$$

Le principe de superposition implique que :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\sigma}^j + \boldsymbol{\varepsilon}_I \quad (3.19)$$

Dans (3.18), $\boldsymbol{\varepsilon}^*$ est la déformation libre uniforme (représentant les déformations plastiques) à laquelle le grain I est soumis. Le problème (3.18) étant linéaire, la déformation $\boldsymbol{\varepsilon}_I$ peut être réécrite sous la forme :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_I(\underline{x}) = \mathbf{S}(\underline{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}^* \quad (3.20)$$

où \mathbf{S} est un tenseur d'ordre 4 qui ne dépend que de la forme du grain et des paramètres du matériau, il est donc entièrement déterminé à partir de Ω , Ω_I et \mathbf{C} . Il en résulte que :

$$\int_{\Omega_I} \boldsymbol{\varepsilon} \, d\Omega = |\Omega_I| (\mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\sigma}^j + \mathbf{S}_I : \boldsymbol{\varepsilon}^*) \quad (3.21)$$

Où l'on a posé la moyenne volumique :

$$\mathbf{S}_I = \frac{1}{|\Omega_I|} \int_{\Omega_I} \mathbf{S}(\underline{x}) \, d\Omega \quad (3.22)$$

En remplaçant (3.21) dans (3.11) on trouve :

$$\begin{aligned} \Phi = & -\frac{1}{2} |\Omega| \boldsymbol{\sigma}^j : \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\sigma}^j - |\Omega_I| \boldsymbol{\sigma}^j : \boldsymbol{\varepsilon}^* - \frac{1}{2} |\Omega_I| \boldsymbol{\varepsilon}^* : \mathbf{C} : \mathbf{S}_I : \boldsymbol{\varepsilon}^* \\ & + \frac{1}{2} |\Omega_I| \boldsymbol{\varepsilon}^* : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^* + \frac{1}{2} \int_{\Omega_I} \mathbf{X} : \boldsymbol{\varepsilon}^* \, d\Omega \end{aligned} \quad (3.23)$$

Le tenseur de raideur de quatrième ordre \mathbf{C} est supposé isotrope, c'est-à-dire de la forme :

$$\mathbf{C} = 2\mu \mathbf{J} + k_0 \frac{\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}}{3} \quad (3.24)$$

où μ (MPa) et k_0 (MPa) sont les modules de cisaillement et de compressibilité respectivement, $\mathbf{1}$ est l'identité du second ordre et $\mathbf{J} = \mathbf{I} - (1/3)\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}$, où \mathbf{I} désigne le tenseur identité du quatrième ordre.

Étant donné qu'un seul système de glissement est activé et en utilisant (3.5), l'énergie potentielle (3.23) se réduit à :

$$\begin{aligned} \Phi[\Delta\gamma^*] = & -\frac{1}{2}|\Omega| \boldsymbol{\sigma}^j : \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\sigma}^j - |\Omega_I| \bar{\beta}^j (\Delta\gamma^* + \gamma^{p,j-1}) \\ & + \frac{1}{2}|\Omega_I| \alpha (\Delta\gamma^* + \gamma^{p,j-1})^2 \end{aligned} \quad (3.25)$$

où :

$$\begin{cases} \bar{\beta}^j = \underline{n}_s \cdot \boldsymbol{\sigma}^j \cdot \underline{t}_s \\ \alpha = \mu \left(1 - \frac{1}{2}(\underline{n}_s \otimes \underline{t}_s + \underline{t}_s \otimes \underline{n}_s) : \mathbf{S}_I : (\underline{n}_s \otimes \underline{t}_s + \underline{t}_s \otimes \underline{n}_s) \right) + \frac{\xi_X}{2} \end{cases} \quad (3.26)$$

3.3.2.2 Énergie dissipée

On s'intéresse ici à l'énergie $\mathcal{D}[\Delta\gamma^*]$ dissipée sur le demi-cycle j pour un incrément donné $\Delta\gamma^*$ du glissement plastique. En plus de l'écroissage cinématique introduit en (3.7), un écroissage linéaire isotrope est également pris en compte et la contrainte de cisaillement critique est exprimée par :

$$\tau_C = \tau_0 + \xi \eta^* \quad (3.27)$$

où τ_0 est la contrainte de cisaillement initiale, ξ le coefficient d'écroissage isotrope, et :

$$\eta^*(\Delta\gamma^*) = |\Delta\gamma^*| + \eta^{p,j-1} \quad (3.28)$$

Dans cette dernière relation, η^* est le glissement plastique cumulé à la fin du demi-cycle j et $\eta^{p,j-1}$ est le glissement plastique cumulé à la fin du demi-cycle $j-1$.

Étant donné que τ_C évolue, il est nécessaire de calculer l'énergie dissipée sous forme d'une intégrale sur le demi-cycle de chargement. L'énergie dissipée infinitésimale par unité de volume pour un glissement plastique infinitésimal $d\gamma$ est de $\tau_C d\gamma$, donc :

$$\mathcal{D}[\Delta\gamma^*] = \int_{\Omega_I} \left[\int_0^{|\Delta\gamma^*|} \tau_C d\gamma \right] d\Omega \quad (3.29)$$

En outre, étant donné qu'on suppose que le glissement plastique est uniforme dans chaque grain, et en intégrant (3.28) et (3.27) dans (3.29), on obtient :

$$\mathcal{D}[\Delta\gamma^*] = |\Omega_I| \left(\tau_0 + \xi \eta^{p,j-1} + \frac{\xi}{2} |\Delta\gamma^*| \right) |\Delta\gamma^*| \quad (3.30)$$

3.3.3 Minimisation de l'énergie incrémentale

L'incrément de glissement plastique $\Delta\gamma^{p,j}$ est obtenu par minimisation de l'énergie totale $F = \Phi + \mathcal{D}$ sur l'ensemble des incréments virtuels $\Delta\gamma^*$, c'est-à-dire :

$$\Delta\gamma^p = \underset{\Delta\gamma^*}{\operatorname{argmin}}(F[\Delta\gamma^*]) = \underset{\Delta\gamma^*}{\operatorname{argmin}}(\Phi[\Delta\gamma^*] + \mathcal{D}[\Delta\gamma^*]) \quad (3.31)$$

Il convient de noter que la non-linéarité associée au comportement élasto-plastique est entièrement contenue dans le problème de minimisation (3.31). La condition de stationnarité pour le problème de minimisation (3.31) nécessite de calculer la dérivée des énergies potentielles et dissipées par rapport aux glissements plastiques. On a :

$$\frac{\partial\Phi}{\partial\Delta\gamma^*} = |\Omega_I| [-\bar{\beta}^j + \alpha(\Delta\gamma^* + \gamma^{p,j-1})] \quad (3.32)$$

Étant donné que $|\Delta\gamma^*|$ apparaît dans l'énergie dissipée, on ne peut pas considérer la dérivée en $\Delta\gamma^* = 0$. Ainsi, à partir de (3.25) et (3.30), la dérivée s'écrit pour $\Delta\gamma^* \neq 0$:

$$\frac{\partial\mathcal{D}}{\partial\Delta\gamma^*} = |\Omega_I| (\tau_0 + \xi(\eta^{p,j-1} + |\Delta\gamma^*|)) \frac{\Delta\gamma^*}{|\Delta\gamma^*|} \quad (3.33)$$

Les conditions de stationnarité conduisent donc à :

$$\frac{\partial F}{\partial\Delta\gamma^p} = 0 \Leftrightarrow -\bar{\beta}^j + \alpha(\Delta\gamma^p + \gamma^{p,j-1}) + (\tau_0 + \xi(\eta^{p,j-1} + |\Delta\gamma^p|)) \frac{\Delta\gamma^p}{|\Delta\gamma^p|} = 0 \quad (3.34)$$

En utilisant (3.34), on arrive à déterminer l'incrément du glissement plastique pour un demi-cycle de chargement donné j :

$$\Delta\gamma^{p,j} = \begin{cases} \Delta\gamma^+ & \text{si } \Delta\gamma^+ > 0 \\ \Delta\gamma^- & \text{si } \Delta\gamma^- < 0 \\ 0 & \text{si } \Delta\gamma^+ \leq 0 \text{ et } \Delta\gamma^- \geq 0 \end{cases} \quad (3.35)$$

avec

$$\begin{cases} \Delta\gamma^+ = \frac{\bar{\beta}^j - \alpha\gamma^{p,j-1} - (\tau_0 + \xi\eta^{p,j-1})}{\alpha + \xi} \\ \Delta\gamma^- = \frac{\bar{\beta}^j - \alpha\gamma^{p,j-1} + (\tau_0 + \xi\eta^{p,j-1})}{\alpha + \xi} \end{cases} \quad (3.36)$$

L'équation (3.36) peut être réécrite de cette manière compacte :

$$\Delta\gamma^{p,j} = \frac{1}{\alpha + \xi} \mathcal{P}(\bar{\beta}^j - \alpha\gamma^{p,j-1}, \tau_0 + \xi\eta^{p,j-1}) \quad (3.37)$$

où \mathcal{P} est la fonction définie par :

$$\mathcal{P}(x, \tau) = \begin{cases} x - \tau & \text{si } x > \tau \\ x + \tau & \text{si } x < -\tau \\ 0 & \text{si } |x| \leq \tau \end{cases} \quad (3.38)$$

L'expression (3.37) est une relation de récurrence sur les incréments plastiques $\Delta\gamma^{p,j}$ qui permet d'évaluer de manière successive l'évolution du glissement plastique au cours des cycles de chargement.

3.4 Mise en oeuvre

3.4.1 Approximation des grains en ellipsoïdes

L'implémentation de la formule itérative (3.37) nécessite de déterminer le système de glissement actif dans le grain ainsi que de retrouver l'expression explicite du tenseur d'ordre quatre \mathbf{S}_I . Le problème définissant \mathbf{S}_I est très similaire au problème d'inclusion d'Eshelby, donnant l'expression analytique de \mathbf{S}_I pour de nombreuses formes d'inclusions (sphères, cylindres elliptiques, Penny-shaped, ellipsoïdes aplaties, sphéroïdes aplaties, sphéroïdes allongés). Dans le cas général d'un grain de forme quelconque, on ne peut pas déterminer le tenseur \mathbf{S}_I de façon analytique. Au lieu d'évaluer \mathbf{S}_I numériquement (ce qui pourrait être implémenté en utilisant des calculs aux éléments finis), nous avons choisi d'approcher le grain par un ellipsoïde (ou un ellipse dans le cas 2D) ce qui permet d'utiliser directement les expressions données par Eshelby et Mura [90] (Voir l'annexe C).

Les deux informations nécessaires pour l'approximation du grain en ellipsoïde sont le centre du polyèdre constituant le grain considéré et les coordonnées de ses sommets. Rappelons qu'un ellipsoïde peut être caractérisée par une équation de la forme :

$$\mathbb{U} = \{u \in \mathbb{R}^3 \mid \|Au + s\|_2 \leq 1\}$$

avec A une matrice définie positive de taille 3×3 et $s \in \mathbb{R}^3$ un vecteur définissant le centre de l'ellipsoïde. Les ellipsoïdes les mieux ajustées, c'est-à-dire les ellipsoïdes conservant au mieux la forme et le volume du grain, peuvent être générées suivant différentes méthodes.

Deux méthodes ont été testées.

Méthode 1 : *L'ellipsoïde à volume minimal englobant le grain.*

Soit \mathbb{P} l'ensemble des sommets $v_k = (x_k, y_k, z_k)$ du grain (où k est l'indice du sommet). Trouver l'ellipsoïde de volume minimal englobant le grain revient à résoudre le problème d'optimisation sous contrainte exprimé ci-dessous :

$$\begin{cases} \min & \log(\det(A^{-1})) \\ \text{sous contrainte :} & \sup_{v \in \mathbb{P}} \|Av + s\|_2 \leq 1 \end{cases} \quad (3.39)$$

Ce problème peut être résolu numériquement à l'aide de l'algorithme de Khachiyan [101], [102]. Cet algorithme prend en entrées les points de l'ensemble \mathbb{P} constituant le nuage des sommets ainsi qu'une tolérance spécifiant la différence acceptée avec la valeur optimale. Diminuer cette tolérance améliore la précision de l'approximation obtenue mais augmente les temps de calcul.

Méthode 2 : *L'ellipsoïde à volume maximal contenu dans le grain*

Au lieu de considérer l'ellipsoïde contenant l'ensemble des sommets, il est aussi possible de considérer l'ellipsoïde à volume maximal inscrit dans le grain [103]. Pour ce faire, considérons \mathbb{D} l'ensemble des inégalités linéaires décrivant l'intérieur du grain grâce à ses m faces planes :

$$\mathbb{D} = \{x \in \mathbb{R}^3 \mid a_i^T x \leq d_i, i = 1, \dots, m\} \quad (3.40)$$

Avec a_i sont les vecteurs normaux vers l'extérieur de chaque face du polyèdre et d_i sont les vecteurs qui définissent l'écart à l'origine des faces (plan affine). L'ellipsoïde à volume maximal est solution du problème d'optimisation convexe suivant :

$$\begin{cases} \max & \log(\det(A^{-1})) \\ \text{sous contrainte :} & \|Aa_i\|_2 + a_i^T s \leq d_i \quad i = 1, \dots, m \end{cases} \quad (3.41)$$

Ce problème d'optimisation convexe est résolu à l'aide d'un algorithme d'optimisation d'ellipsoïde de volume maximal inscrit [104]. Il est implémenté dans *matlab* via le package CVX (système de modélisation pour les optimisations).

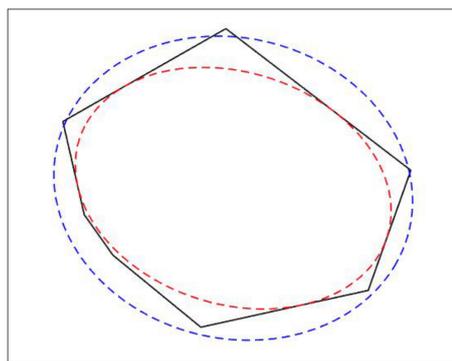


FIGURE 3.3 – Un grain I polygonal approximé en ellipse, (bleu) Méthode 1, (rouge) Méthode 2

Les paramètres de l'ellipsoïde optimal (notamment les longueurs de ses demi-axes et son inclinaison) sont obtenus par décomposition de la matrice A en valeurs singulières. La figure 3.3 illustre les résultats des deux approximations proposées dans

le cas bidimensionnel.

Le chapitre suivant consacré aux polycristaux et fera apparaître des intégrales définies sur différentes ellipsoïdes et pour éviter des singularités dans les calculs de ces intégrales il est nécessaire d'éviter toute superposition entre ces ellipsoïdes. En conséquence l'approximation de l'ellipsoïde de volume maximal inscrit dans le grain s'avère être la plus raisonnable.

3.4.2 Détermination du système de glissement activé

Pour déterminer le système de glissement r activé dans l'inclusion elliptique I définie dans (3.5), on considère comme mentionné précédemment que le modèle mésoscopique est celui d'un métal à structure cubique à faces centrées (CFC) (voir la définition (c)).

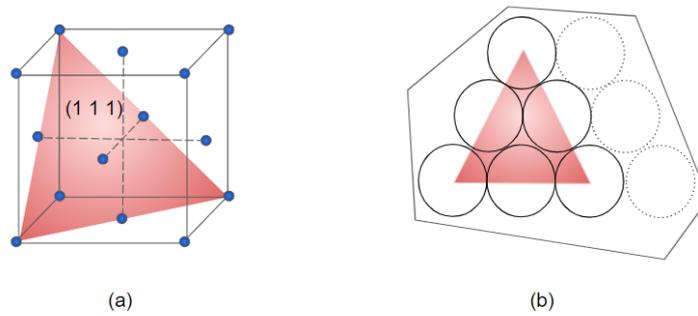


FIGURE 3.4 – Exemple de système de glissement dans le grain I

Dans ce cas, les systèmes de glissement sont définis selon la notation du tétraèdre de *Thompson* pour les matériaux CFC, où 12 systèmes de glissement peuvent être activés chacun dans 2 directions pour un modèle tridimensionnel (dont le plan (111) est représenté en rouge à la figure 3.4.a). Le passage au cas bidimensionnel [105] correspond à des polycristaux plans hexagonaux où le plan de glissement (111) est supposé aligné avec le plan du grain, limitant ainsi le nombre de système de glissement possibles aux trois systèmes de glissement dans le plan.

En 3D, l'orientation cristallographique est déterminée par l'orientation du tétraèdre de *Thompson*, c'est-à-dire par les 3 angles $(\Theta_1, \Theta_2, \Theta_3)$. Dans le cas 2D seul l'angle Θ est considéré et le seul système de glissement activé r vérifie :

$$r(I) = \operatorname{argmax}_{1 \leq s \leq 3} |\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{m}_s| \quad (3.42)$$

Où \mathbf{m}_s est défini par (3.2) grâce à $(\underline{n}_s, \underline{t}_s)$ définis en 2D par :

$$\begin{cases} \underline{n}_s = \begin{pmatrix} -\sin(\Theta + \phi_s) \\ \cos(\Theta + \phi_s) \end{pmatrix} , \text{ avec } \phi_s \in \{0^\circ, 60^\circ, 120^\circ\} \\ \underline{t}_s = \begin{pmatrix} \cos(\Theta + m\phi_s) \\ \sin(\Theta + m\phi_s) \end{pmatrix} , \text{ avec } m \in \{-1, 1\} \end{cases} \quad (3.43)$$

Où l'angle ϕ_s définit les trois directions de glissement de l'inclusion tandis que m définit le sens du glissement et Θ est l'orientation cristalline. Une relation similaire est obtenue en 3D.

3.5 Domaine de validité du modèle mésoscopique

Le modèle mésoscopique que nous avons présenté permet de calculer rapidement le glissement plastique et le glissement plastique cumulé pour n'importe quel nombre de cycles du chargement. On s'intéresse ici à la validation de ce modèle. Il s'agit de s'assurer de la fiabilité des résultats obtenus, d'identifier les sources d'erreurs et les améliorations à apporter si nécessaire. On réalise cette validation par comparaison avec les résultats de simulation par éléments finis, effectuée dans le logiciel *Freefem++*. L'algorithme utilisé pour la résolution du problème de plasticité cristalline est présenté dans la suite.

3.5.1 Construction du modèle éléments finis

Pour simplifier la présentation, on se place ici dans le cas sans écrouissage. Considérons $\gamma_s^{p,0}$ le glissement plastique dans le grain à l'instant t_n . En adoptant un schéma d'Euler implicite, le glissement plastique à l'instant t_{n+1} est déterminé par le système suivant :

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) = 0 & \text{dans } \Omega \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{n} = \underline{T}(x, t_{n+1}) & \text{sur } \partial\Omega \\ \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \left(\boldsymbol{\varepsilon} - \sum_{s=1}^M \gamma_s^p \mathbf{m}_s \right) & \text{dans } \Omega_I \\ \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} & \text{dans } \Omega - \Omega_I \\ \gamma_s^p - \gamma_s^{p,0} = 0 & \text{si } |\underline{n}_s \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{t}_s| < \tau_C \\ > 0 & \text{si } \underline{n}_s \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{t}_s = \tau_C \\ < 0 & \text{si } \underline{n}_s \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{t}_s = -\tau_C \end{cases} \quad (3.44)$$

Résoudre (3.44) revient à résoudre le problème de minimisation suivant :

$$\begin{aligned} & \inf_{\underline{u}(x), \gamma_s^p(x)} \int_{\Omega_I} \frac{1}{2} (\boldsymbol{\varepsilon}(x) - \sum_s \gamma_s^p(x) \mathbf{m}_s) : \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon}(x) - \sum_s \gamma_s^p(x) \mathbf{m}_s) \, d\Omega_I \\ & - \int_{\partial\Omega_I} \underline{\mathbf{T}}(x) \cdot \underline{\mathbf{u}}(x) \, dS + \tau_C \int_{\Omega_I} \sum_s |\gamma_s^p(x) - \gamma_s^{p,0}(x)| \, d\Omega_I \end{aligned} \quad (3.45)$$

La résolution du problème d'optimisation (3.45) peut s'effectuer par minimisation alternée, c'est-à-dire en minimisant successivement par rapport au déplacement $\underline{u}(x)$ (à glissement plastique fixe) puis par rapport au glissement plastique $\gamma_s^p(x)$ (à déplacement fixe).

A glissement plastique fixe, la minimisation par rapport au déplacement revient à résoudre :

$$\begin{aligned} & \inf_{\underline{u}(x)} \int_{\Omega_I} \frac{1}{2} (\boldsymbol{\varepsilon}(x) - \sum_s \gamma_s^p(x) \mathbf{m}_s) : \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon}(x) - \sum_s \gamma_s^p(x) \mathbf{m}_s) \, d\Omega_I \\ & - \int_{\partial\Omega_I} \underline{\mathbf{T}}(x) \cdot \underline{\mathbf{u}}(x) \, dS \end{aligned} \quad (3.46)$$

Ceci correspond à un problème d'élasticité linéaire qui peut être facilement résolu numériquement par éléments finis.

A déplacement fixé, la minimisation par rapport au glissement plastique $\gamma_s^p(x)$ revient à résoudre :

$$\begin{aligned} & \inf_{\gamma_s^p(x)} \int_{\Omega_I} \left(\frac{1}{2} (\boldsymbol{\varepsilon}(x) - \sum_s \gamma_s^p(x) \mathbf{m}_s) : \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon}(x) - \sum_s \gamma_s^p(x) \mathbf{m}_s) \right. \\ & \left. + \tau_C \sum_s |\gamma_s^p(x) - \gamma_s^{p,0}(x)| \right) \, d\Omega_I \end{aligned} \quad (3.47)$$

Il s'agit cette fois d'un problème non linéaire mais local, dont les conditions d'optimalité (à vérifier en chaque point de Ω_I) s'écrivent :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \sum_M \gamma_s^p \mathbf{m}_s) & \\ \gamma_s^p - \gamma_s^{p,0} = 0 & \text{si } |\underline{n}_s \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{t}_s| < \tau_C \\ > 0 & \text{si } \underline{n}_s \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{t}_s = \tau_C \\ < 0 & \text{si } \underline{n}_s \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{t}_s = -\tau_C \end{array} \right. \quad (3.48)$$

Une façon de résoudre (3.48) est de mettre ce problème sous la forme d'un problème de complémentarité linéaire (PCL), c'est-à-dire un problème de la forme :

$$Y = M X + q; \quad X \geq 0; \quad Y \geq 0; \quad X \cdot Y = 0 \quad (3.49)$$

avec M une matrice de taille $(n \times n)$ et q un vecteur de taille n , et $X, Y \in \mathbb{R}^n$. Cette reformulation s'effectue à l'aide du changement de variable suivant :

$$Z_s^+ = \langle \gamma_s^p - \gamma_s^{p,0} \rangle_+ = \begin{cases} = \gamma_s^p - \gamma_s^{p,0} & \text{si } \gamma_s^p \geq \gamma_s^{p,0} \\ = 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

$$Z_s^- = \langle \gamma_s^p - \gamma_s^{p,0} \rangle_- = \begin{cases} = \gamma_s^{p,0} - \gamma_s^p & \text{si } \gamma_s^p \leq \gamma_s^{p,0} \\ = 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

$$\tau_s^+ = \tau_C - \underline{n}_s \cdot \underline{\sigma} \cdot \underline{t}_s$$

$$\tau_s^- = \underline{n}_s \cdot \underline{\sigma} \cdot \underline{t}_s + \tau_C$$

On introduit les vecteurs X et Y suivant :

$$X = \begin{pmatrix} Z_s^+ \\ Z_s^- \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} \tau_s^+ \\ \tau_s^- \end{pmatrix}$$

On peut vérifier que les vecteurs X et Y ainsi définis vérifient un système de la forme (3.49). L'intérêt de cette reformulation vient du fait qu'il existe plusieurs algorithmes qui sont capables de résoudre numériquement le PCL. Un exemple couramment utilisé est l'algorithme de projection de point de *Neumann* qui utilise une approche de projection sur un sous-espace. Où encore l'algorithme appelé PSOR "Projected successive over-relaxation" de Cryer [106] qui résout les PCL avec des matrices de différences finies, c'est la méthode itérative de référence. Il y a aussi l'algorithme de Borigi et Liithi [107], de type pivot, qui est adapté au PCL obtenu lors de l'évaluation d'options. Dans notre application on a opté pour l'algorithme de Lemke [108] qui est dérivé de la méthode du simplexe. L'algorithme commence par trouver un point de départ pour la recherche de la solution, puis utilise une série de rotations de base pour déplacer la solution vers le bas dans l'espace des variables. Il répète ce processus jusqu'à ce qu'il atteigne une solution qui satisfait les contraintes du PCL.

La résolution numérique du PCL sur *Freefem++* permet de retrouver les glissements plastiques dans chaque point x et pour chaque système de glissement.

3.5.2 Résultats et discussions

Le domaine de validité du modèle mésoscopique est évalué en comparant les glissements plastiques avec les résultats obtenus par EF. La comparaison est réalisée pour un grain 2D au centre d'une matrice élastique homogène avec une épaisseur e suffisamment large pour éviter tout effet de bord. Le chargement considéré est un cisaillement pur $\underline{\sigma} = \sigma \underline{e}_1 \otimes \underline{e}_2$, appliqué sur la frontière de cette matrice élastique. On considère ici un seul demi-cycle de chargement, au cours duquel σ passe de 0 à

une valeur finale de 103 MPa. Les paramètres du matériau sont récapitulés dans le tableau ci-dessous :

E (GPa)	ν	σ (MPa)	ξ (MPa)	τ_0 (MPa)
210	0.3	103	1615.38	100

TABLE 3.1 – Paramètres du matériau et du chargement macroscopique

Le maillage considéré est triangulaire régulier dans un domaine carré de taille 1×1 avec un raffinement de 100 noeuds par unité de longueur. Le modèle EF renvoie le glissement plastique calculé en chaque noeud du maillage. Une moyenne sur chaque grain est calculée pour effectuer la comparaison. On obtient ainsi les cartes de glissements plastiques de la figure 3.5, qui résument les glissements pour les trois systèmes de glissement possibles (le signe du glissement plastique définit sa direction).

Le glissement plastique est dominant sur l'un des trois systèmes de glissement SG_1 3.5a, ce qui confirme l'hypothèse qu'un seul SG est activé. L'erreur relative entre le modèle EF et le modèle mésoscopique est définie comme étant $err = \frac{|\gamma_F^p - \gamma^p|}{\gamma_F^p}$, avec γ_F^p le glissement plastique sur *Freefem++*.

Pour le grain illustré à la figure 3.5a, cette erreur est de 4,12%. Cette erreur, considérée comme acceptable, est due à l'approximation géométrique du grain par une ellipse et à l'inhomogénéité du glissement plastique dans le grain. Ces résultats préliminaires confirment que le modèle mésoscopique est capable d'identifier le SG dominant dans le cristal et de prédire le glissement plastique avec une précision acceptable.

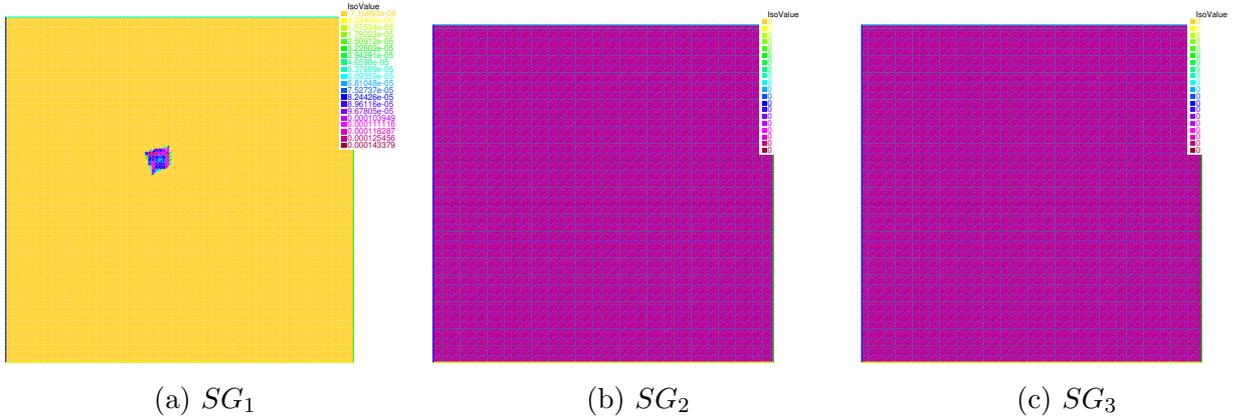


FIGURE 3.5 – Cartes de glissement plastique pour une amplitude de chargement de $103MPa$

L'erreur dépend notamment de la forme et la taille du grain (qui sont contenus dans le coefficient α défini par (3.26)) ainsi que de l'amplitude du chargement macroscopique (contenue dans le coefficient $\bar{\beta}^j$ défini par (3.26)). L'influence de ces paramètres est évaluée dans ce qui suit.

3.5.2.1 Taille et forme du grain

La figure 3.6 montre les résultats obtenus en faisant varier le diamètre équivalent du grain et son ellipticité. Ces résultats sont reportés dans un diagramme montrant le glissement plastique calculé par le modèle mésoscopique en abscisse, et l'erreur relative avec la valeur éléments finis en ordonnées. Chaque point reporté dans ce diagramme correspond à une géométrie de grain particulière, montrant ainsi que le modèle a tendance à être d'autant plus précis que le glissement plastique est grand. Notons qu'à chargement égal, les grains donnant lieu à des glissements importants sont les grains critiques à l'origine de l'initiation de fissures en fatigue, auxquels on s'intéresse en priorité dans cette étude. La moyenne de l'erreur pour les grains à glissement plastique de l'ordre de 10^{-5} est limitée à 5.55%. Sur cette figure, on observe que pour des formes de grain particulières l'approximation conduit à des erreurs très élevées (de l'ordre de 36%). Nous illustrons à la fois le cas le plus favorable (grain en bas) et le cas le plus défavorable (grain en haut) de l'approximation.

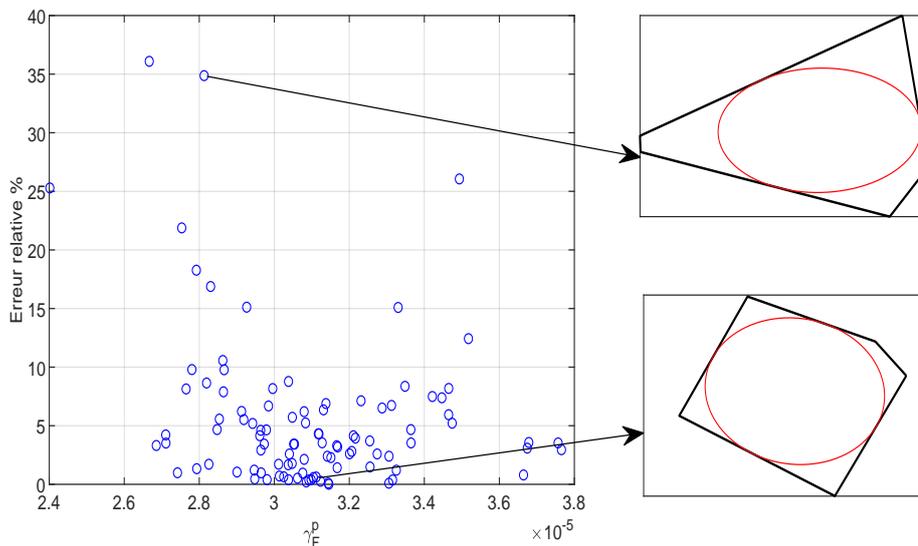


FIGURE 3.6 – Erreur relative en fonction du glissement plastique dans *Freefem++* avec deux exemples des grains correspondant à une erreur élevée et une erreur faible.

De plus, en traçant l'évolution de l'erreur en fonction de la densité du maillage (définie comme étant le nombre de noeuds du maillage dans le grain par unité de longueur), on trouve que les grains avec une densité de maillage faible tendent à présenter les erreurs les plus grandes (figure 3.7).

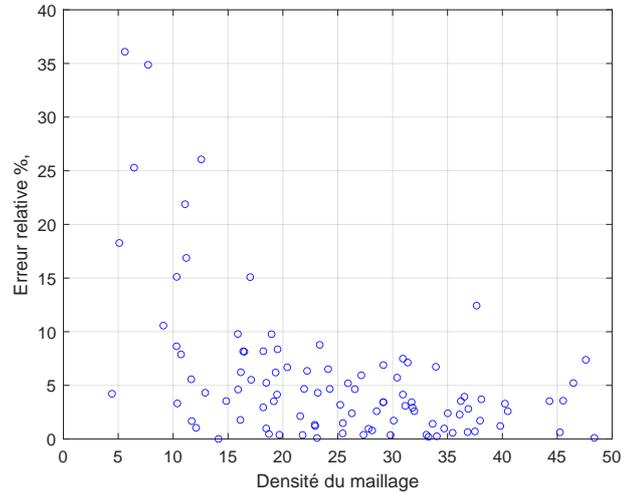


FIGURE 3.7 – Erreur relative en fonction du de la densité.

En limitant la comparaison aux grains à densité de maillage représentative et pour lesquels l'approximation par ellipse est performante, l'erreur moyenne diminue jusqu'à 3.82%.

3.5.2.2 Amplitude du chargement macroscopique

L'amplitude du chargement macroscopique a un impact sur le glissement plastique des grains dans le matériau. Le chargement appliqué sur le matériau peut influencer la distribution des contraintes dans le grain et ainsi affecter les systèmes de glissement qui sont activés. Plus cette amplitude est élevée, plus il y a de chances que les systèmes de glissement deviennent actifs, ce qui ne s'accorde pas avec l'hypothèse 3 faite en 3.3.1 selon laquelle un seul système de glissement est actif dans le grain. Ce phénomène est illustré à la figure 3.8 montrant les glissements plastiques pour $\sigma = 120$ MPa. Des valeurs de glissement plastique sont enregistrées sur les trois systèmes de glissement dans le grain. Un système reste dominant, mais les valeurs de glissement pour les autres systèmes augmentent considérablement avec l'amplitude du chargement macroscopique. D'où la nécessité de l'hypothèse 1 dans 3.3.1 qui limite notre modèle aux niveaux de chargement faible par rapport au cisaillement critique des cristaux.

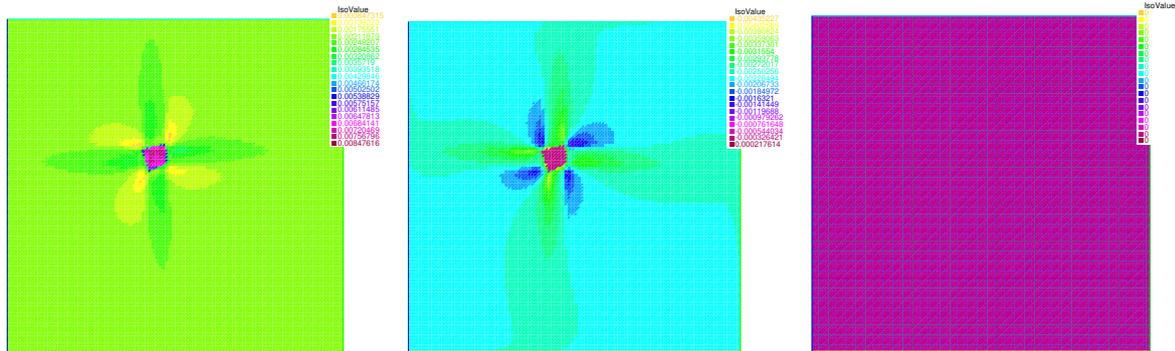


FIGURE 3.8 – Cartes de glissement plastique pour une amplitude de chargement de 120 MPa

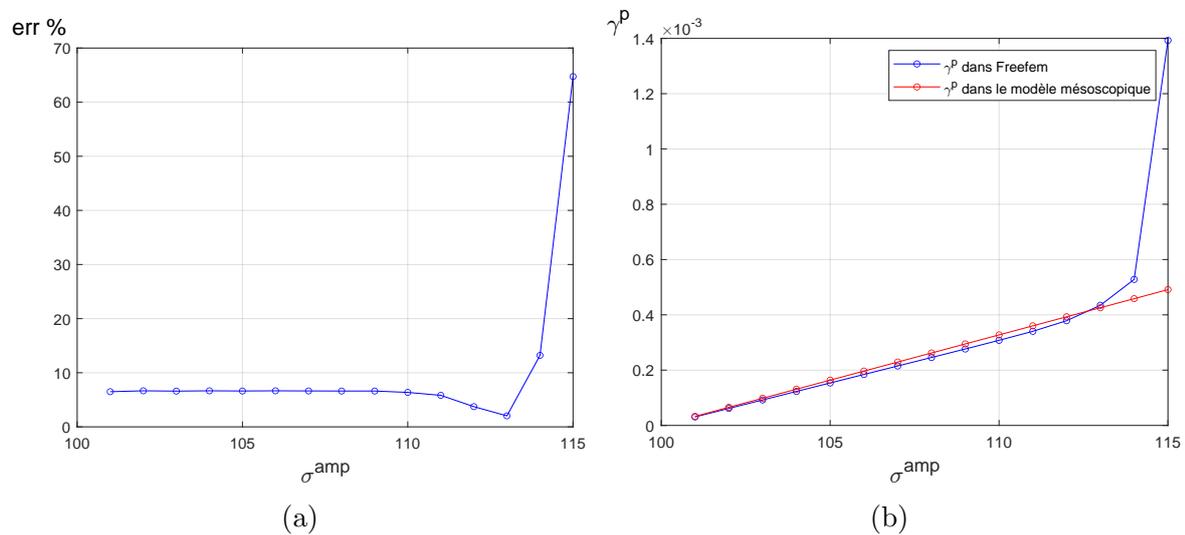


FIGURE 3.9 – Erreur relative en fonction de l’amplitude du chargement, et évolution du glissement plastique sur le système dominant en fonction de l’amplitude du chargement

En comparant l’évolution du glissement plastique sur les deux modèles (modèle rapide et modèle EF) en fonction de l’amplitude du chargement macroscopique appliqué, on arrive à repérer le chargement à partir duquel l’hypothèse 3 dans 3.3.1 (portant sur l’unicité du système de glissement activé) n’est plus valable. Comme le montre la figure 3.9b, l’écart entre les 2 modèles est faible (erreur relative de l’ordre de 6%) jusqu’à ce que le chargement atteigne $\sigma = 114$ MPa soit $1.14 \tau_C$. On peut vérifier que cette valeur du chargement correspond à l’activation d’un deuxième système de glissement.

L’hypothèse 1 dans 3.3.1 sur le niveau du chargement est une hypothèse forte qui limite le modèle mais garantit aussi sa précision. En effet pour des niveaux de chargement faible ($\leq 1.14 \tau_C$) l’erreur moyenne est de 6.48%.

3.6 Conclusion

Dans le cas d'un chargement cyclique, la méthode exposée dans ce chapitre donne une formule de récurrence explicite permettant de calculer l'évolution du glissement plastique et du glissement plastique cumulé au cours des cycles de chargement. Les hypothèses nécessaires à l'obtention de ce résultat sont pertinentes pour le régime de fatigue à grand nombre de cycles. Les quantités calculées (glissement plastique et glissement plastique cumulé) jouent un rôle central pour quantifier la durée de vie en fatigue. La comparaison avec un calcul aux éléments finis montre que la méthode proposée identifie correctement le système de glissement activé et donne une bonne estimation du glissement plastique. La méthode proposée a l'intérêt d'être rapide en temps de calcul (1.3 s pour 10^6 cycles sur un PC portable) et fait explicitement apparaître l'influence de l'orientation cristalline, de la forme et de l'inclinaison du grain par rapport à la direction de chargement. De ce fait, cette méthode est adaptée à des analyses probabilistes vis-à-vis de la microstructure. Dans le chapitre suivant, la méthode exposée est étendue aux polycristaux où plusieurs grains sont susceptibles de plastifier en même temps.

Chapitre 4

Modèle mésoscopique rapide pour les polycristaux

Sommaire

4.1	Introduction	46
4.2	Extension du modèle mésoscopique aux polycristaux	47
4.2.1	Énergie potentielle d'un polycristal	47
4.2.2	Minimisation de l'énergie incrémentale	49
4.3	Application à deux grains dans une matrice élastique	54
4.4	Génération de polycristaux	57
4.5	Mise en oeuvre de la méthode simplifiée sur une tessellation arbitraire	59
4.6	Validation	61
4.6.1	Résultats	62
4.7	Conclusion	65

4.1 Introduction

Dans ce chapitre, l'approche présentée précédemment est étendue au cas général d'un polycristal. La principale différence porte sur l'énergie potentielle élastique, qui fait apparaître des termes d'interaction entre les grains. Dans le cas général, on ne peut résoudre le problème de minimisation incrémental que de façon numérique. En introduisant des hypothèses de couplage faible entre les grains, on montre cependant qu'il devient possible de résoudre le problème explicitement. La solution ainsi obtenue est validée numériquement par comparaison avec des calculs aux éléments finis. On étudie d'abord le cas simple de deux grains elliptiques afin de mettre en évidence l'influence du couplage. On étudie ensuite un exemple de tessellation à distributions

d'orientation cristalline et à texture morphologique aléatoires, avec un nombre de grains représentatif.

4.2 Extension du modèle mésoscopique aux polycristaux

Considérons un volume élémentaire représentatif (VER) occupant un domaine Ω et composé de N grains, chacun occupant des sous-domaines disjoints $\Omega^1, \dots, \Omega^N$ vérifiant $\cup_j \Omega^j = \Omega$. L'orientation cristalline dans le grain j est caractérisée par une rotation \mathbf{R}^j par rapport à un cristal de référence, de sorte que les équations constitutives dans le grain j sont obtenues en remplaçant \mathbf{m}_i par $\mathbf{m}_i^j = {}^T \mathbf{R}^j \mathbf{m}_i^I \mathbf{R}^j$ dans (3.2). Pour $\underline{x} \in \Omega^j$ on a alors

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\sigma}^j + \sum_{i=1}^M \gamma_i \mathbf{m}_i^j \quad (4.1)$$

On conserve les trois hypothèses dans la section 3.3.1 assurant ainsi que \mathbf{C} est le même pour tous les grains. En gardant les mêmes notations que celles introduites dans le chapitre 3, on effectue dans la suite le bilan énergétique du polycristal. Par rapport au chapitre précédent, la principale modification porte sur l'énergie élastique qui fait apparaître des termes d'interaction entre les grains, comme détaillé dans la section suivante.

4.2.1 Énergie potentielle d'un polycristal

4.2.1.1 Formulation

On considère que le VER Ω est soumis à un chargement macroscopique $\boldsymbol{\sigma}^j$ et on note $\boldsymbol{\varepsilon}_k^*$ la déformation libre uniforme définie dans le grain k (avec $1 \leq k \leq N$). Partant de l'expression (3.6) pour l'énergie élastique stockée dans chaque grain, l'énergie potentielle Φ du polycristal s'écrit :

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \int_{\Omega_k} (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_k^*) : \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_k^*) d\Omega - \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{\sigma}^j \cdot \underline{n}) \cdot \underline{u} dS + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \int_{\Omega_k} \mathbf{X} : \boldsymbol{\varepsilon}_k^* d\Omega \quad (4.2)$$

Où \underline{u} et $\boldsymbol{\varepsilon}$ sont respectivement le champ de déplacement et le champ de déformation solutions du problème d'élasticité suivant :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_k^*) \text{ dans } \Omega_k, (\forall k, 1 \leq k \leq N) \\ \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) = 0 \text{ dans } \Omega \\ \boldsymbol{\sigma}^j \cdot \underline{n} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{n} \text{ sur } \partial\Omega \\ \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\nabla \underline{u} + \nabla \underline{u}^T) \end{cases} \quad (4.3)$$

Une procédure similaire à celle présentée dans le chapitre précédent permet de réécrire Φ comme une fonction explicite de $\boldsymbol{\sigma}^j$ et $(\boldsymbol{\varepsilon}_1^*, \dots, \boldsymbol{\varepsilon}_N^*)$. Nous n'en reprenons ici que les étapes principales. Par le principe de superposition on obtient que :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\sigma}^j + \sum_{k=1}^N \boldsymbol{\varepsilon}_k \quad (4.4)$$

Où $\boldsymbol{\varepsilon}_k$ est le champ de contrainte correspondant à la solution du problème d'une inclusion unique (grain k soumis à un champ de déformation libre $\boldsymbol{\varepsilon}_k^*$) avec des conditions aux limites libres. Ce problème est défini par les équations suivantes :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma}_k = \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon}_k - \boldsymbol{\varepsilon}_k^*) \text{ dans } \Omega_k \\ \boldsymbol{\sigma}_k = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_k \text{ dans } \Omega - \Omega_k \\ \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}_k) = 0 \text{ dans } \Omega \\ \boldsymbol{\sigma}_k \cdot \underline{n} = 0 \text{ sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (4.5)$$

On a par linéarité du problème (4.5) :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_k(\underline{x}) = \mathbf{S}_k(\underline{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}_k^* \quad (4.6)$$

Où les tenseurs \mathbf{S}_k de quatrième ordre sont entièrement déterminés à partir de Ω , Ω_k et \mathbf{C} . En posant leur moyenne volumique sur les différents grains :

$$\mathbf{S}_{kl} = \frac{1}{|\Omega_k|} \int_{\Omega_k} \mathbf{S}_l(\underline{x}) d\Omega \quad (4.7)$$

on arrive (en omettant le détail des calculs) à :

$$\begin{aligned} \Phi = & -\frac{1}{2} |\Omega| \boldsymbol{\sigma}^j : \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\sigma}^j - \sum_{k=1}^N |\Omega_k| \boldsymbol{\sigma}^j : \boldsymbol{\varepsilon}_k^* - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N |\Omega_k| \boldsymbol{\varepsilon}_k^* : \mathbf{C} : \mathbf{S}_{kl} : \boldsymbol{\varepsilon}_l^* \\ & + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N |\Omega_k| \boldsymbol{\varepsilon}_k^* : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_k^* + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \int_{\Omega_k} \mathbf{X} : \boldsymbol{\varepsilon}_k^* d\Omega \end{aligned} \quad (4.8)$$

L'expression (4.5) est quadratique en $(\boldsymbol{\sigma}^j, \boldsymbol{\varepsilon}_1^*, \dots, \boldsymbol{\varepsilon}_r^*)$ comme on pouvait s'y attendre vue la linéarité du problème d'élasticité (4.3). Toutes les informations sur la microstructure (forme et distribution des grains) sont contenues dans les tenseurs de type Eshelby \mathbf{S}_{kl} .

4.2.1.2 Propriétés des tenseurs S_{kl}

En notant χ_k la fonction caractéristique du domaine Ω_k , la solution du problème d'inclusion unique (4.5) satisfait :

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}' : \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon}_k - \chi_k(\underline{x})\boldsymbol{\varepsilon}_k^*) d\Omega = 0 \quad (4.9)$$

pour tout champ de déformation $\boldsymbol{\varepsilon}'$ dérivant d'un champ de déplacement cinématiquement admissible. En prenant $\boldsymbol{\varepsilon}' = \boldsymbol{\varepsilon}_l$ on obtient :

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}_l : \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon}_k - \chi_k(\underline{x})\boldsymbol{\varepsilon}_k^*) d\Omega = 0 \quad (4.10)$$

En échangeant les rôles de k et l dans le raisonnement, on obtient de manière similaire :

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}_k : \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon}_l - \chi_l(\underline{x})\boldsymbol{\varepsilon}_l^*) d\Omega = 0 \quad (4.11)$$

D'où :

$$\int_{\Omega_k} \boldsymbol{\varepsilon}_k^* : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_l d\Omega = \int_{\Omega_l} \boldsymbol{\varepsilon}_l^* : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_k d\Omega \quad (4.12)$$

En utilisant (4.6) et (4.7) on arrive à la propriété suivante, qui sera utile dans la suite :

$$|\Omega_k| \boldsymbol{\varepsilon}_k^* : \mathbf{C} : \mathbf{S}_{kl} : \boldsymbol{\varepsilon}_l^* = |\Omega_l| \boldsymbol{\varepsilon}_l^* : \mathbf{C} : \mathbf{S}_{lk} : \boldsymbol{\varepsilon}_k^* \quad (4.13)$$

4.2.2 Minimisation de l'énergie incrémentale

Comme au chapitre précédent, nous considérons le demi cycle j de chargement, à la fin duquel le chargement macroscopique atteint une valeur $\boldsymbol{\sigma}^j$. Au début du demi-cycle j , la valeur du glissement plastique $\gamma_k^{p,j-1}$ dans chaque grain est supposée connue. Les incréments de glissement plastique sur le demi-cycle sont obtenus en minimisant l'énergie incrémentale $\Phi[\Delta\gamma_1^*, \dots, \Delta\gamma_N^*] + \mathcal{D}[\Delta\gamma_1^*, \dots, \Delta\gamma_N^*]$ par rapport à tous les incréments plastiques virtuels $\Delta\gamma_1^*, \dots, \Delta\gamma_N^*$.

Puisqu'un seul système de glissement plastique est actif dans chaque grain selon la troisième hypothèse de 3.3.1, l'énergie potentielle prend la forme :

$$\begin{aligned} \Phi [\Delta\gamma_1^*, \dots, \Delta\gamma_N^*] &= -\frac{1}{2} |\Omega| \boldsymbol{\sigma}^j : \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\sigma}^j - \sum_{k=1}^N |\Omega_k| \bar{\beta}_k^j (\Delta\gamma_k^* + \gamma_k^{p,j-1}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N |\Omega_k| \alpha_{kl} (\Delta\gamma_k^* + \gamma_k^{p,j-1}) (\Delta\gamma_l^* + \gamma_l^{p,j-1}) \end{aligned} \quad (4.14)$$

Où l'on a posé :

$$\begin{cases} \bar{\beta}_k^j = \underline{n}_k \cdot \boldsymbol{\sigma}^j \cdot \underline{t}_k \\ \alpha_{kl} = \mu \left(\delta_{kl} - \frac{1}{2} (\underline{n}_k \otimes \underline{t}_k + \underline{t}_k \otimes \underline{n}_k) : \mathbf{S}_{kl} : (\underline{n}_l \otimes \underline{t}_l + \underline{t}_l \otimes \underline{n}_l) \right) + \frac{\xi_X}{2} \delta_{kl} \end{cases} \quad (4.15)$$

Le coefficient $\bar{\beta}_k^j$ est la contrainte de cisaillement macroscopique résolue dans le grain k . Les coefficients α_{kl} sont indépendants de la valeur de $\boldsymbol{\sigma}^j$ et décrivent l'interaction élastique entre les grains k et l , qui décroît avec la distance entre les grains. Notons que la propriété (4.13) implique que :

$$|\Omega_k| \alpha_{kl} = |\Omega_l| \alpha_{lk} \quad (4.16)$$

L'énergie dissipée $\mathcal{D} [\Delta\gamma_1^*, \dots, \Delta\gamma_N^*]$ est obtenue en sommant l'énergie dissipée sur les différents grains :

Étant donné qu'on suppose que le glissement plastique est uniforme dans chaque grain k , on obtient :

$$\mathcal{D} [\Delta\gamma_1^*, \dots, \Delta\gamma_N^*] = \sum_{k=1}^N |\Omega_k| \left(\tau_k^0 + \xi \eta_k^{p,j-1} + \frac{\xi}{2} |\Delta\gamma_k^*| \right) |\Delta\gamma_k^*| \quad (4.17)$$

Avec τ_k^0 la limite d'élasticité associée à chaque grain k .

Procédons maintenant à la minimisation de l'énergie incrémentale $\Phi + \mathcal{D}$ par rapport à $\Delta\gamma_1^*, \dots, \Delta\gamma_N^*$. La dérivée de l'énergie potentielle par rapport aux glissements plastiques donne :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \Delta\gamma_k^*} = |\Omega_k| \left[-\bar{\beta}_k^j + \sum_{l=1}^N \alpha_{kl} (\Delta\gamma_l^* + \gamma_l^{p,j-1}) \right] \quad (4.18)$$

De (4.17), la dérivée de l'énergie dissipée pour $\Delta\gamma_k^* \neq 0$ se lit :

$$\frac{\partial \mathcal{D}}{\partial \Delta\gamma_k^*} = |\Omega_k| \left(\tau_k^0 + \xi \eta_k^{p,j-1} + \xi |\Delta\gamma_k^*| \right) \frac{\Delta\gamma_k^*}{|\Delta\gamma_k^*|} \quad (4.19)$$

Les conditions de stationnarité donnent donc :

$$-\bar{\beta}_k^j + \sum_{l=1}^N \alpha_{kl} (\Delta\gamma_l^p + \gamma_l^{p,j-1}) + (\tau_k^0 + \xi\eta_k^{p,j-1} + \xi|\Delta\gamma_k^*|) \frac{\Delta\gamma_k^p}{|\Delta\gamma_k^p|} = 0 \quad (4.20)$$

pour tout k (avec $1 \leq k \leq N$). Dans le système (4.20), toutes les inconnues $\Delta\gamma_1^p, \dots, \Delta\gamma_N^p$ sont couplées à travers les coefficients d'interaction α_{kl} . Le système (4.20) est également non linéaire du fait des termes en $\frac{\Delta\gamma_k^p}{|\Delta\gamma_k^p|}$. Dans le cas général, on ne peut résoudre ce système que de façon numérique en utilisant par exemples des méthodes de type active set ou des algorithmes de points intérieurs. On montre dans la suite que le recours à ces méthodes peut être évité sous certaines hypothèses.

4.2.2.1 Cas sans interaction

Le problème (4.20) est facile à résoudre dans le cas préliminaire où aucune interaction élastique n'est considérée entre les grains du polycristal, c'est-à-dire quand le problème est totalement découplé et que les grains sont indépendants. L'incrément du glissement plastique dans le grain k est tout simplement identique à celui d'un monocristal plongé dans une matrice élastique homogène et infinie et prend la valeur retrouvée dans l'équation (3.36) où $\alpha_{kk} = \alpha$ et $\alpha_{kl} = 0$ pour $l \neq k$. Dans le reste de ce chapitre on note cet incrément $\Delta^0\gamma_k^j$, c'est à dire :

$$\Delta^0\gamma_k^j = \begin{cases} \Delta^0\gamma_k^+ & \text{si } \Delta^0\gamma_k^+ > 0 \\ \Delta^0\gamma_k^- & \text{si } \Delta^0\gamma_k^- < 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.21)$$

Où l'on a posé :

$$\begin{cases} \Delta^0\gamma_k^+ = \frac{1}{\tilde{\alpha}_{kk}} (\bar{\beta}_k - \alpha_{kk}\gamma_k^{p,j-1} - \tau_k^{j-1}) \\ \Delta^0\gamma_k^- = \frac{1}{\tilde{\alpha}_{kk}} (\bar{\beta}_k - \alpha_{kk}\gamma_k^{p,j-1} + \tau_k^{j-1}) \end{cases} \quad (4.22)$$

et $\tilde{\alpha}_{kk} = \alpha_{kk} + \xi$, $\tau_k^{j-1} = \tau_k^0 + \xi\eta_k^{p,j-1}$. Ici $\eta_k^{p,j-1}$ est le glissement plastique cumulé dans le grain k , en début du demi-cycle j .

4.2.2.2 Cas avec interaction faible

Soit $\epsilon_k \in \{-1, 0, 1\}$ le signe de $\Delta\gamma_k$ et ϵ_k^0 le signe de $\Delta^0\gamma_k$. On montre ici qu'il est possible de résoudre le problème (4.20) de façon analytique en adoptant les hypothèses suivantes :

1. Les termes d'interaction α_{kl} (avec $k \neq l$) sont petits comparés aux termes α_{kk} .

2. Le coefficient $x_1 = \bar{\beta}_1 - \epsilon_1 \tau_1^{j-1} + \xi \gamma_1^{p,j-1}$ est beaucoup plus grand (en valeur absolue) que $x_k = \bar{\beta}_k - \epsilon_k \tau_k^{j-1} + \xi \gamma_k^{p,j-1}$ pour $k \neq 1$.

L'hypothèse 2 représente des situations où la plasticité est concentrée dans un seul grain mal orienté (grain 1). Afin de simplifier la présentation, on suppose également que $\epsilon_k = \epsilon_k^0 \neq 0$ pour tout k (cette hypothèse additionnelle n'est pas essentielle et peut être supprimée comme on l'expliquera plus tard). Dans ce cas, on a :

$$\Delta^0 \gamma_k^p = -\gamma_k^{p,j-1} + \frac{x_k}{\tilde{\alpha}_{kk}} \quad (4.23)$$

L'équation (4.20) s'écrit sous la forme du système linéaire suivant :

$$\bar{\beta}_k^j - \tilde{\alpha}_{kk} (\Delta \gamma_k^p + \gamma_k^{p,j-1}) - \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^N \alpha_{kl} (\Delta \gamma_l^p + \gamma_l^{p,j-1}) = \epsilon_k \tau_k^{j-1} - \xi \gamma_k^{p,j-1} \quad (4.24)$$

La solution de (4.24) prend la forme suivante :

$$\begin{bmatrix} \Delta \gamma_1^p \\ \vdots \\ \Delta \gamma_N^p \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \gamma_1^{p,j-1} \\ \vdots \\ \gamma_N^{p,j-1} \end{bmatrix} + (D + H)^{-1} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{bmatrix} \quad (4.25)$$

où D est la matrice diagonale de taille $N \times N$ et de composantes $D_{kk} = \tilde{\alpha}_{kk}$ tandis que H est la matrice de taille $N \times N$ et de composantes $H_{kl} = (1 - \delta_{kl}) \alpha_{kl}$. L'hypothèse 1 implique que $H \ll D$ permettant ainsi l'utilisation de la formule de Sherman-Morrison-Woodbury [109]. Cette formule donne le développement de $(D + H)^{-1}$ au deuxième ordre en H qui se lit :

$$(D + H)^{-1} \simeq D^{-1} - D^{-1} H D^{-1} + D^{-1} H D^{-1} H D^{-1} \quad (4.26)$$

Des calculs directs donnent les coefficients de chacune des matrices D^{-1} , $D^{-1} H D^{-1}$ et $D^{-1} H D^{-1} H D^{-1}$:

$$\begin{aligned} D_{kl}^{-1} &= \frac{\delta_{kl}}{\tilde{\alpha}_{kl}} \\ (D^{-1} H D^{-1})_{kl} &= (1 - \delta_{kl}) \frac{\alpha_{kl}}{\tilde{\alpha}_{kk} \tilde{\alpha}_{ll}} \\ (D^{-1} H D^{-1} H D^{-1})_{kl} &= \frac{1}{\tilde{\alpha}_{kk} \tilde{\alpha}_{ll}} \sum_{s \notin \{k,l\}} \frac{\alpha_{ks} \alpha_{sl}}{\tilde{\alpha}_{ss}} \end{aligned}$$

En remplaçant (4.26) dans (4.25) on obtient (au second ordre en H) :

$$\Delta \gamma_k = \Delta^0 \gamma_k + \frac{1}{\tilde{\alpha}_{kk}} \sum_{l \neq k} \frac{\alpha_{kl}}{\tilde{\alpha}_{ll}} x_l + \frac{1}{\tilde{\alpha}_{kk}} \sum_l \sum_{s \notin \{k,l\}} \frac{\alpha_{ks} \alpha_{sl}}{\tilde{\alpha}_{ll} \tilde{\alpha}_{ss}} x_l \quad (4.27)$$

On peut simplifier l'expression (4.27) grâce à l'hypothèse 2. Intéressons nous d'abord à la quantité $\Delta\gamma_k$ pour $k \neq 1$. En ne conservant que les termes en x_1 , (4.27) devient :

$$\Delta\gamma_k = \Delta^0\gamma_k + \frac{1}{\tilde{\alpha}_{kk}\tilde{\alpha}_{11}}(\alpha_{k1} + \sum_{s \notin \{k,1\}} \frac{\alpha_{ks}\alpha_{s1}}{\tilde{\alpha}_{ss}})x_1 \quad \text{pour } k \neq 1 \quad (4.28)$$

En utilisant l'hypothèse 1, on obtient (à l'ordre principal en H) :

$$\Delta\gamma_k = \Delta^0\gamma_k + \frac{\alpha_{k1}}{\tilde{\alpha}_{kk}\tilde{\alpha}_{11}}x_1 \quad (4.29)$$

Une procédure un peu différente est nécessaire pour déterminer $\Delta\gamma_1$. On isole les termes pour $l = 1$ dans la deuxième somme de (4.27), ce qui donne :

$$\Delta\gamma_1 = \Delta^0\gamma_1 + \frac{1}{\tilde{\alpha}_{11}^2} \sum_{s \neq 1} \frac{\alpha_{1s}\alpha_{s1}}{\tilde{\alpha}_{ss}}x_1 + \frac{1}{\tilde{\alpha}_{11}} \sum_{l \neq 1} \left(\frac{\alpha_{1l}}{\tilde{\alpha}_{ll}} \left(1 + \sum_{s \notin \{1,l\}} \frac{\alpha_{ls}}{\tilde{\alpha}_{ss}} \right) \right) x_l \quad (4.30)$$

Dans la somme sur l apparaissant dans l'expression ci-dessus, on ne garde que les termes dominants en H . On trouve ainsi :

$$\Delta\gamma_1 = \Delta^0\gamma_1 + \frac{1}{\tilde{\alpha}_{11}} \sum_{k \neq 1} \frac{\alpha_{1k}}{\tilde{\alpha}_{kk}} \left(x_l + \frac{\alpha_{k1}}{\tilde{\alpha}_{11}}x_1 \right) \quad (4.31)$$

Soit $\Delta^1\gamma_k$ la valeur obtenue par les équations (4.29) et (4.31). L'expression de cette valeur est donc réécrite comme suit :

$$\Delta^1\gamma_k = -\gamma_k^0 + \frac{x_k + \alpha_{k1}(\gamma_1^0 + \Delta^0\gamma_1)}{\alpha_{kk}} \quad \text{pour } k \neq 1 \quad (4.32)$$

et

$$\Delta^1\gamma_1 = -\gamma_1^0 + \frac{x_1 + \sum_{k \neq 1} \alpha_{1k}(\gamma_k^0 + \Delta^1\gamma_k)}{\alpha_{11}} \quad (4.33)$$

L'équation (4.32) est identique à l'équation (4.23) si on remplace x_k par $x_k + \alpha_{k1}(\gamma_1^0 + \Delta^0\gamma_1)$. De la même manière, l'équation (4.32) est identique à (4.23) pour $k = 1$ si on remplace x_1 par $x_1 + \sum_{k \neq 1} \alpha_{1k}(\gamma_k^0 + \Delta^1\gamma_k)$. Ceci permet une interprétation simple des équations (4.32) et (4.33) : pour chaque grain $k > 1$, le glissement plastique $\gamma_0^k + \Delta^1\gamma_k$ est calculé à partir de la contrainte moyenne (dans le grain k) écrite sous forme de la somme de la contrainte macroscopique appliquée et de la correction due au glissement plastique dans le grain 1, ce dernier étant calculé comme s'il n'y avait pas d'interaction élastique entre les grains. En second lieu, le glissement plastique dans le grain 1 est corrigé en y ajoutant la contrainte moyenne due au glissement plastique $\gamma_0^k + \Delta^1\gamma_k$ dans chaque grain $k > 1$. Sur cette base, les équations (4.32) et

(4.33) peuvent facilement être étendues à la situation générale où des grains restent élastiques sur le demi-cycle de chargement j :

1. Calculer la valeur de l'incrément du glissement plastique dans le grain 1 (grain critique) dans le cas où aucune interaction élastique n'est considérée :

$$\Delta^0 \gamma_1 = \frac{1}{\alpha_{11} + \xi} \mathcal{P}(\bar{\beta}_1^j - \alpha_{11} \gamma_1^{j-1}, \tau_k^{j-1})$$

2. Calculer la valeur de l'incrément de glissement plastique dans les grains $k = 2, \dots, N$:

$$\Delta^1 \gamma_k = \frac{1}{\alpha_{kk} + \xi} \mathcal{P}(\bar{\beta}_k^j + \alpha_{k1}(\gamma_1^0 + \Delta^0 \gamma_1) - \alpha_{kk} \gamma_k^{j-1}, \tau_k^{j-1})$$

3. Mettre à jour l'incrément du glissement plastique dans le grain 1 ;

$$\Delta^1 \gamma_1 = \frac{1}{\alpha_{kk} + \xi} \mathcal{P}(\bar{\beta}_k^j + \sum_{k \neq 1} \alpha_{1k}(\gamma_k^0 + \Delta^1 \gamma_k) - \alpha_{11} \gamma_1^{j-1}, \tau_1^{j-1})$$

Les expressions obtenues sont entièrement explicites et évitent toute résolution de problème non linéaire. Nous pouvons en outre observer que seules les intégrales α_{kk} , α_{1k} , α_{k1} apparaissent dans les expressions finales, c'est-à-dire que le calcul des termes d'interaction α_{kl} (pour $l \neq 1$) entre les grains environnant le grain critique n'est pas nécessaire. En outre, la propriété (4.13) implique que α_{k1} se déduit directement de α_{1k} . En pratique il n'y a donc que N coefficients α_{kl} à évaluer.

4.3 Application à deux grains dans une matrice élastique

Afin de valider les développements présentés, considérons dans un premier temps l'exemple de 2 grains elliptiques noyés dans une matrice élastique supposée infinie comme illustrée à la figure 4.1a. Les grains sont de forme identique et ne diffèrent que par leur inclinaison et orientation cristalline comme indiqué dans le tableau 4.1 (toutes les longueurs sont sans dimension). L'inclinaison θ de l'ellipse (par rapport au repère de référence $(\underline{e}_1, \underline{e}_2)$) coïncide avec l'orientation cristalline dans le grain. Les paramètres du matériau sont les suivants : $E = 210000$ MPa, $\nu = 0.3$, $\tau_0 = 100$ MPa, $\xi = \xi_X = 0$.

Au temps $t = 0$, les déformations plastiques sont prises égales à 0. Au temps t^0 , on

applique une contrainte macroscopique $\bar{\sigma} = \tau(\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_2 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_1)$ avec $\tau = 101$ MPa et on calcule les glissements plastiques γ_1^p et γ_2^p dans les grains 1 et 2. Les orientations dans le tableau 4.1 ont été choisies de telle sorte que le grain 1 (grain rouge dans 4.1a) soit le grain mal orienté (grain critique) c'est à dire le grain qui plastifie en premier. Les glissements plastiques ont été calculés par différentes méthodes :

1. En utilisant l'expression (4.22), c'est-à-dire sans tenir compte de l'interaction entre les grains.
2. En utilisant les formules simplifiées (4.32) et (4.33) .
3. En utilisant la résolution directe du problème (4.20), c'est-à-dire sans aucune hypothèse sur les amplitudes du glissement plastique et les coefficients α_{kl} .
4. En utilisant les calculs par éléments finis (EF) sur *Freefem++*.

Le domaine Ω a été considéré comme suffisamment grand par rapport à la taille des grains afin de minimiser les effets de bord (la taille de Ω était typiquement 20 fois la taille des grains).

Grain N°	a	b	θ (°)
1	0.15	0.1	29.35
2	0.15	0.1	33.35

TABLE 4.1 – Paramètres géométriques des grains ellipsoïdaux

Puisque les glissements plastiques calculés par EF ne sont généralement pas uniformes à l'intérieur de chaque grain, les valeurs moyennes par grain ont été calculées. Les valeurs obtenues sont ainsi reportées dans les figures 4.1b et 4.1c pour plusieurs valeurs de la distance d entre les grains 1 et 2. La position du grain 1 en rouge dans 4.1a étant maintenue fixe, on varie la position du grain 2 (en bleu).

Les résultats obtenus pour le grain 1, figure 4.1b prouvent que le glissement plastique γ^p ne varie pas de façon monotone avec la distance entre les grains. Ce dernier suit une courbe concave qui présente en effet un maximum pour une valeur non nulle de la distance et converge pour $d \gg a$ vers la valeur calculée dans le cas sans interaction.

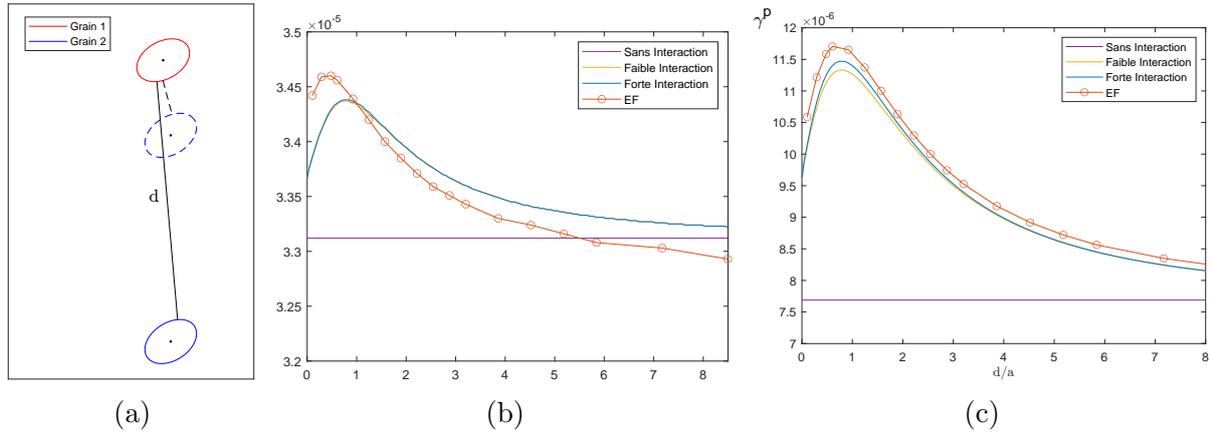


FIGURE 4.1 – Schéma explicatif (a). Glissement plastique en fonction de la distance pour (b) dans le grain 1 et (c) dans le grain 2

Le glissement plastique obtenu par EF montre un comportement croissant-décroissant qui est bien retranscrit par la formule simplifiée (4.32) et (4.33). En particulier, la valeur de la distance correspondant au glissement plastique maximal est à peu près la même entre les simulations EF et la formule simplifiée. La résolution directe du problème (4.20) n'améliore pas les résultats de manière significative par rapport à la formule simplifiée. Cependant, négliger totalement l'interaction entre grains (ligne droite sur la figure) amène à perdre le comportement croissant-décroissant et conduit à une erreur significative sur le glissement plastique pour les petites distances entre les grains (jusqu'à 50% par rapport à la valeur obtenue par EF). En utilisant la formule simplifiée (4.32) et (4.33), l'erreur maximale tombe à 9%. Les mêmes commentaires s'appliquent au grain 2, figure 4.1c. Cependant, étant donné que les glissements plastiques dans le grain 1 atteignent des valeurs plus élevées que dans le grain 2, les corrections relatives dues à l'interaction sont plus faibles pour le grain 2. L'expression (4.22) négligeant l'interaction donne une erreur maximale relative (par rapport à la valeur EF) d'environ 4,7%. L'erreur baisse à 2,3% en utilisant la formule simplifiée (4.32) et (4.33). On remarque aussi qu'à partir d'une certaine distance critique DC (de l'ordre de $3a$) l'influence de l'interaction devient négligeable et le modèle sans interaction est suffisant pour prédire correctement la valeur du glissement plastique. On résume cette partie en confirmant que le modèle mésoscopique à interaction faible pour ce cas préliminaire (à deux grains) :

- Diminue les erreurs commises sur le glissement plastique comparé au modèle sans interaction du premier chapitre et souligne l'importance de l'interaction entre les grains.
- Est suffisant pour décrire précisément le comportement du glissement plastique dans le grain puisqu'il garde la même allure et presque les mêmes valeurs que celles du modèle avec interaction forte.
- N'est plus nécessaire pour les grains à distance $d > 3a$ du grain critique.

4.4 Génération de polycristaux

Il existe des techniques expérimentales pour obtenir des morphologies de polycristaux réels. Citons par exemple les techniques de sectionnement en série où encore le contraste d'absorption microtomographie à rayons X qui permettent l'identification d'une variété de caractéristiques microstructurales (en 3D ainsi que pour des sections 2D) telles que le forme des grains, le volume et les surfaces limites des grains. Dans ce travail, les morphologies polycristallines utilisées ont été générées numériquement à l'aide du logiciel *Neper* [110]. Ce logiciel génère des tessellations en se basant sur le *diagramme de Voronoi* tel qu'il est décrit dans [111, 112] qui divise un plan ou un volume en n cellules à partir d'un nombre donné de points appelés *Seed*. Ces cellules adjacentes représentent les grains du polycristal.

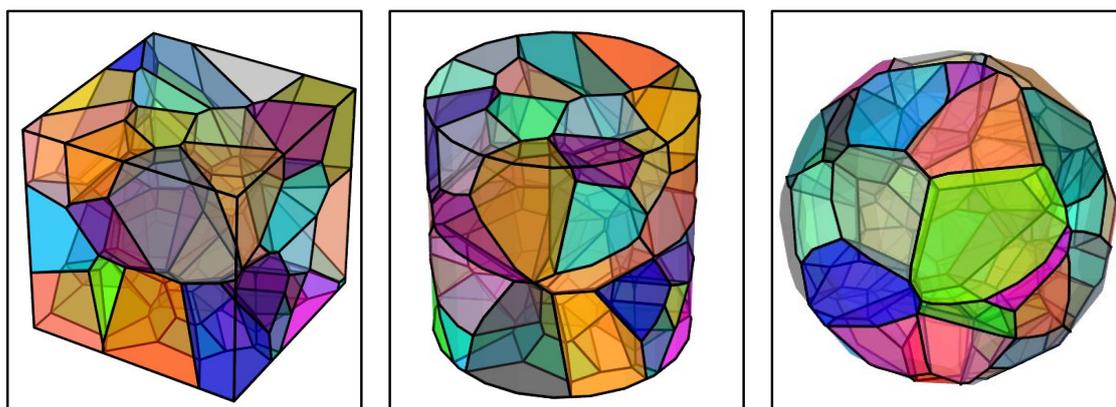


FIGURE 4.2 – Polycristaux tridimensionnels construit dans *Neper* dans des domaines spatiaux différents

Neper permet de construire des polycristaux dans tout domaine spatial convexe

en 3D et en 2D (en particulier cubes et cylindres) comme le montre la figure 4.2. Il est possible de contrôler la distribution spatiale des cellules, leurs tailles et formes comme mis en évidence dans la figure 4.3 (du tout imposé au tout aléatoire).

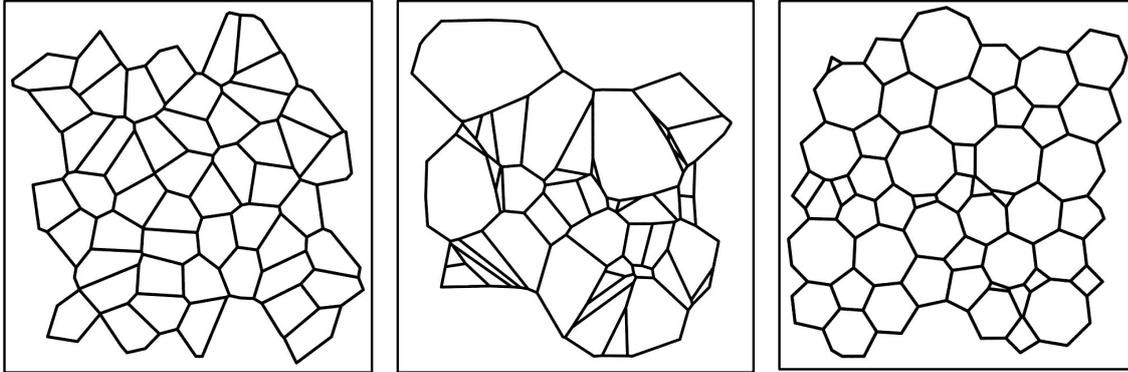


FIGURE 4.3 – Polycristaux bidimensionnels construit dans *Neper* pour des morphologies différentes

Tous les fichiers d’entrée et sortie sont au format accessible ASCII. Les tessellations de Voronoï sont exportées au format natif du logiciel “.tess”, qui peuvent être aisément converties pour être exploitées dans d’autres logiciels (*Matlab* et *Freefem++* dans notre cas).

L’identification des grains critiques dans un polycristal dépend entièrement de la distribution des orientations cristallines attribuées aux grains ainsi que du chargement macroscopique appliqué. La méthode d’affectation des orientations cristallines adoptée est la méthode probabiliste introduite dans [105]. Partant de la première tessellation représentée sur la figure 4.3 et qui contient 50 grains générés aléatoirement, les figures 4.4.a et 4.4.b montrent deux distributions d’orientations obtenues suivant des densités de probabilités différentes (la première une loi uniforme $\mathcal{U}(0, 60)$ et la deuxième une gaussienne $\mathcal{N}(30, 4)$).

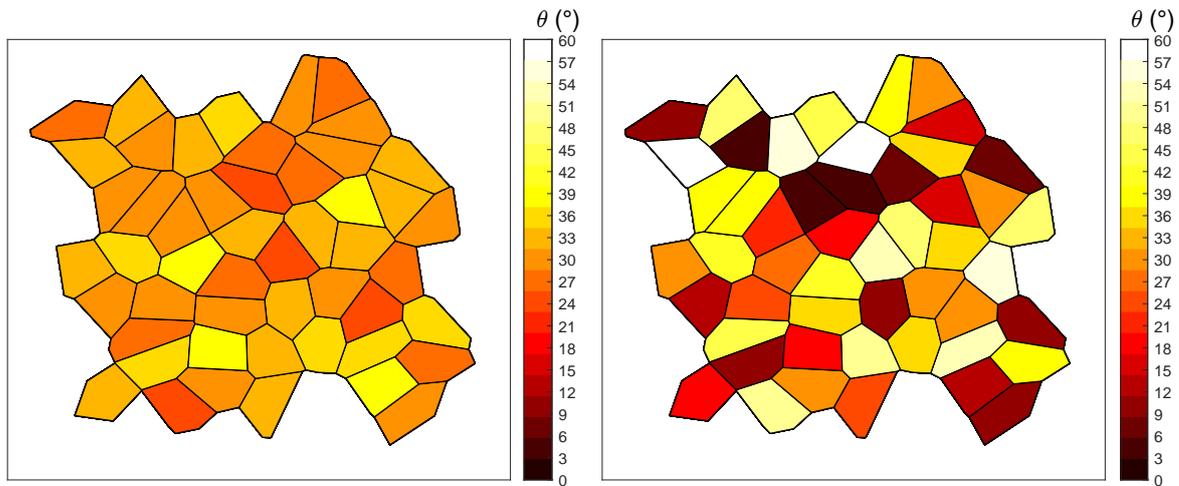


FIGURE 4.4 – Deux distributions d’orientations cristallines suivant des densités de probabilités différentes (a) Loi uniforme (b) Loi gaussienne.

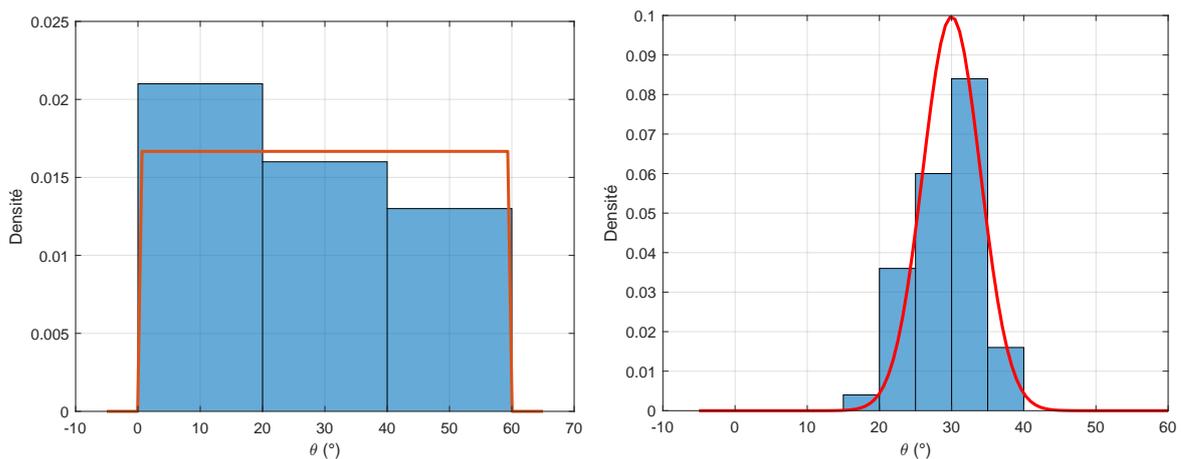


FIGURE 4.5 – Histogrammes de la distribution appliquée ainsi que la fonction de densité de probabilité cible en ligne rouge (a) Loi uniforme (b) Loi gaussienne

4.5 Mise en oeuvre de la méthode simplifiée sur une tessellation arbitraire

La mise en oeuvre de la méthode proposée sur une tessellation arbitraire passe par 3 étapes préalables :

1. L’identification du système de glissement plastique critique (c’est-à-dire celui qui sera activé en premier) dans chaque grain. Ce système de glissement dépend du mode de chargement considéré, c’est-à-dire de la forme de la contrainte

macroscopique σ^j choisie. Cette étape permet également d'identifier les grains critiques qui vont plastifier en premier.

2. L'approximation des grains en ellipses (ou ellipsoïdes dans le cas 3D). A titre d'exemple, la figure 4.6a représente les deux méthodes d'approximation introduites précédemment et appliquées à la première tessellation de la figure 4.3. Les ellipses en rouges sont les ellipses inscrites dans les grains et les ellipses en bleu sont les ellipses qui englobent les grains. Le recouvrement des ellipses en bleu pose problème lors des calculs des intégrales des coefficients α_{kl} , aussi l'utilisation des ellipses inscrites est privilégiée.

3. L'identification d'un voisinage pertinent pour chaque grain critique.

Cette dernière étape consiste à identifier, pour chaque grain critique, les grains qui seront pris en compte dans les formules d'interaction. Comme dans [113] un ensemble de N_V voisinages est défini pour chaque grain du polycristal, où $N_V = 0$ correspond au grain critique et le voisinage N_V est défini par l'ensemble des grains qui partageant au moins une arête avec les grains du voisinage précédent $N_V - 1$. Dans cette étude on adopte la définition classique de la zone d'endommagement identique à [86] qui se traduit par une zone circulaire centrée sur le grain critique et qui dépend des caractéristiques microstructurales du matériau exprimé sous la forme d'une distance critique DC servant comme rayon de la zone circulaire d'endommagement.

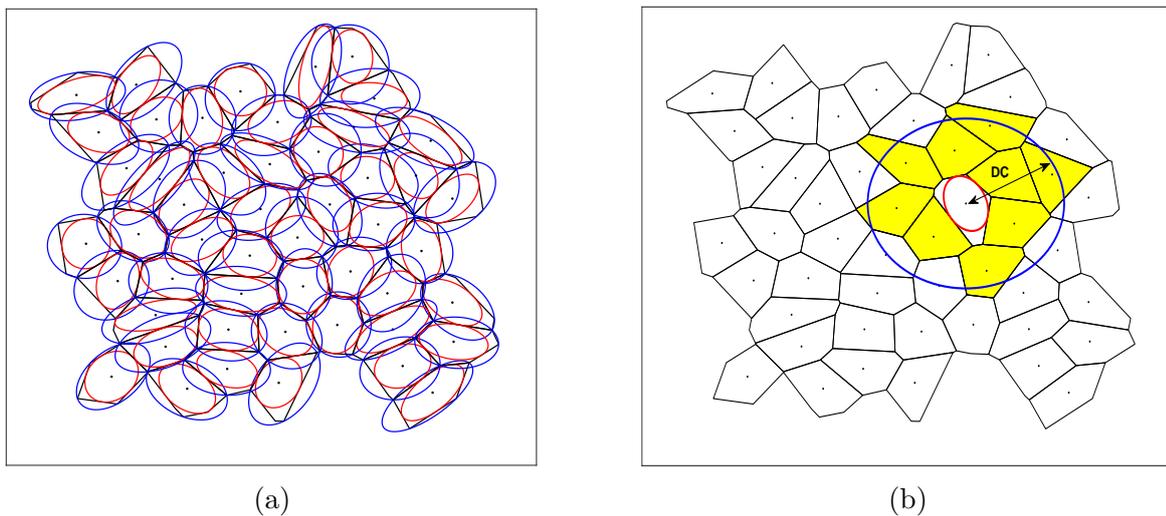


FIGURE 4.6 – Une tessellation de 50 grains approximés en ellipses (a) avec exemple de grains voisins (b)

Un exemple d'identification de voisinage est présenté dans la figure 4.6b. La distance DC correspond généralement à $(\sim 2a, 3a)$ avec a le grand demi-axe du grain

critique (en rouge) dans 4.6b. La zone d'endommagement dans le cas où $DC = 3a$ est défini par le cercle en bleu. Les grains qui composent ce voisinage sont ceux dont les *Seeds* sont à l'intérieur du cercle bleu. Par comparaison avec le voisinage 1 de [86], la méthode utilisée ici est plus inclusive puisqu'elle inclut non seulement les grains qui partagent des arêtes avec le grain critique mais aussi les grains proches en termes de distance.

4.6 Validation

On cherche à valider la méthode proposée par comparaison avec un calcul éléments finis. Le polycristal utilisé a été généré par *Neper* et comporte 500 grains avec une orientation cristalline définie par une loi normale et favorisant la dispersion des grains critiques dans le polycristal. Les propriétés du matériau sont définies dans le tableau 4.2.

E (GPa)	ν	σ_{amp} (MPa)	σ_{moy} (MPa)	ζ/μ (MPa ⁻¹)	τ_0 (MPa)
210	0.3	101	0	1615.38	100

TABLE 4.2 – Paramètres de matériau et de chargement macroscopique

Où l'on a posé le chargement macroscopique $\boldsymbol{\sigma}^j = (\sigma_{moy} - (-1)^j \sigma_{amp})(\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_2 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_1)$. On se place dans des niveaux de chargement macroscopique σ_{amp} faible afin de respecter les limites du modèle.

La tessellation fournie par *Neper* a été convertie au format *Freefem++* pour les calculs éléments finis. Cette tessellation est englobée dans le domaine carré $[0, 1] \times [0, 1]$ maillé avec une densité de maillage très fine $raf = 200$ (où le raffinement raf représente le nombre de noeuds de maillage par unité de longueur). Pour éviter les effets de bord, le carré $[0, 1] \times [0, 1]$ contenant la tessellation est entouré d'une couronne carrée (d'épaisseur 1) maillée avec une densité de maillage grossière $raf = 5$. Le type de maillage obtenu est visible sur la figure 4.7a(a). Concernant le calcul des glissements plastiques par éléments finis, le passage du monocristal au polycristal ne s'accompagne d'aucune difficulté majeure. La seule différence est que les systèmes de glissement dépendent du point considéré (à travers l'orientation cristalline affectée à chaque grain) au lieu d'être uniforme.

4.6.1 Résultats

Un glissement moyen par grain est calculé à partir des formules analytiques simplifiées (4.32) et (4.33), il est tracé sous forme de carte de couleur à la figure 4.7b. Les grains jaunes sont ceux qui restent élastiques.

En comparant les deux cartes de la figure 4.7b, on remarque d'abord les grains qui contribuent à la plasticité du polycristal (grains autres que jaune) sont bien identifiés. Les grains critiques (grains à niveaux bleu ou violet) sont aussi correctement identifiés.

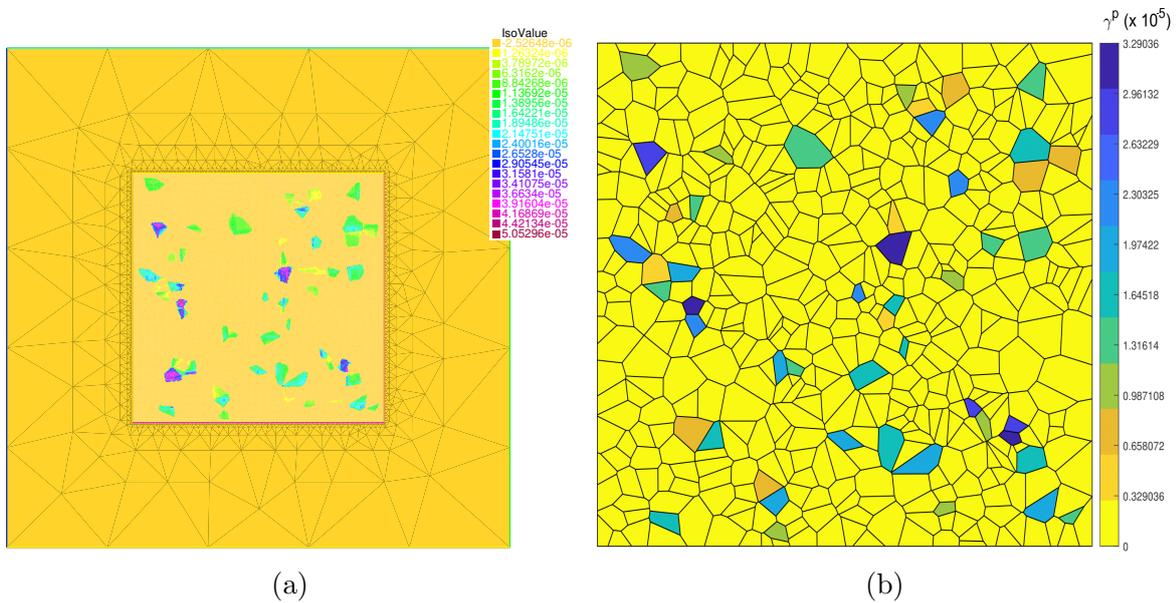


FIGURE 4.7 – Glissements plastiques calculés (a) par EF sur *Freefem++* (b) par le modèle mésoscopique sur *Matlab*

On définit l'erreur relative comme étant la différence entre la dissipation plastique calculée par EF et la dissipation analytique pour un grain k donné divisé par la dissipation maximale du polycristal par EF :

$$err_k = \frac{S_{EF}^k \gamma_{EF}^k - S_{MM}^k \gamma_{MM}^k}{\max_i S_{EF}^i \gamma_{EF}^i} \quad (4.34)$$

Où S_{EF}^k est la taille réelle du grain k dans le calcul EF et S_{MM}^k la taille de l'ellipse approchant ce grain. Cette erreur est tracée en fonction du glissement plastique sur *Freefem++* à la figure 4.8.

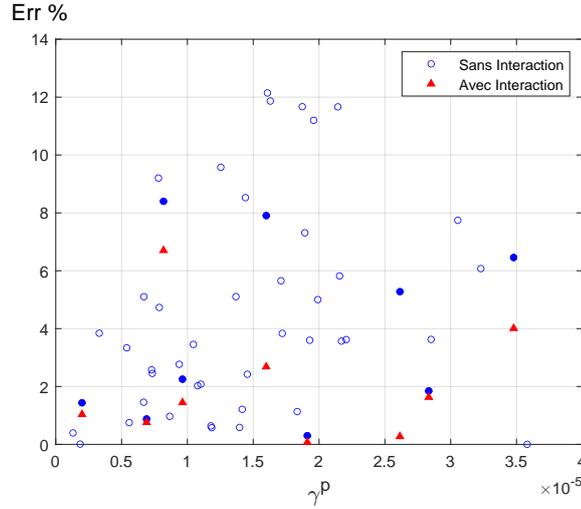


FIGURE 4.8 – Erreur relative tracée en fonction du glissement plastique sur *Free-fem++* dans le cas d’interaction faible puis dans le cas sans interaction

L’erreur moyenne dans la tessellation est de 4.39%. Les grains critiques ayant les dix glissements plastiques les plus élevés dans le polycristal se trouvent à l’extrême droite du graphe 4.8 et ont une erreur moyenne de 4.4%, ce qui est déjà une erreur assez acceptable mais qui peut être améliorée en prenant en compte les interactions entre les grains, comme illustrée à la figure 4.8. Sur cette figure, les points coloriés (disque bleu et triangle rouge) correspondent aux grains vérifiant les hypothèses d’applicabilité des formules d’interaction faible. Pour ces grains, les disques bleus correspondent aux formules ne prenant pas en compte l’interaction, et les triangles rouges correspondent aux nouvelles formules prenant en compte les interactions. On observe ainsi une diminution significative de l’erreur par rapport aux valeurs EF. L’erreur moyenne sur l’ensemble des grains critiques diminue de 16% passant de 4.4% à 3.7%.

Le nouveau modèle mésoscopique avec interaction est donc capable de fournir les valeurs plus précises du glissement plastique dans les grains critiques et la tessellation en général.

Une inspection plus approfondie des résultats est proposée sur les figures 4.9. Les figures 4.9a et 4.9b montrent les glissements plastiques obtenus dans chaque grain, par calcul EF d’une part et en utilisant les formules simplifiées d’autre part. L’erreur relative entre ces 2 calculs est tracée à la figure 4.9c. Concentrons nous sur les grains dont le glissement plastique est élevé, qui sont les grains critiques conditionnant la durée de vie. Pour ces grains, l’erreur est acceptable (<5%) à l’exception des 2 grains entourés en rouge sur la figure 4.9a. Ces 2 grains correspondent à des situations où l’approximation en ellipse est peu performante (l’erreur commise est de 28%).

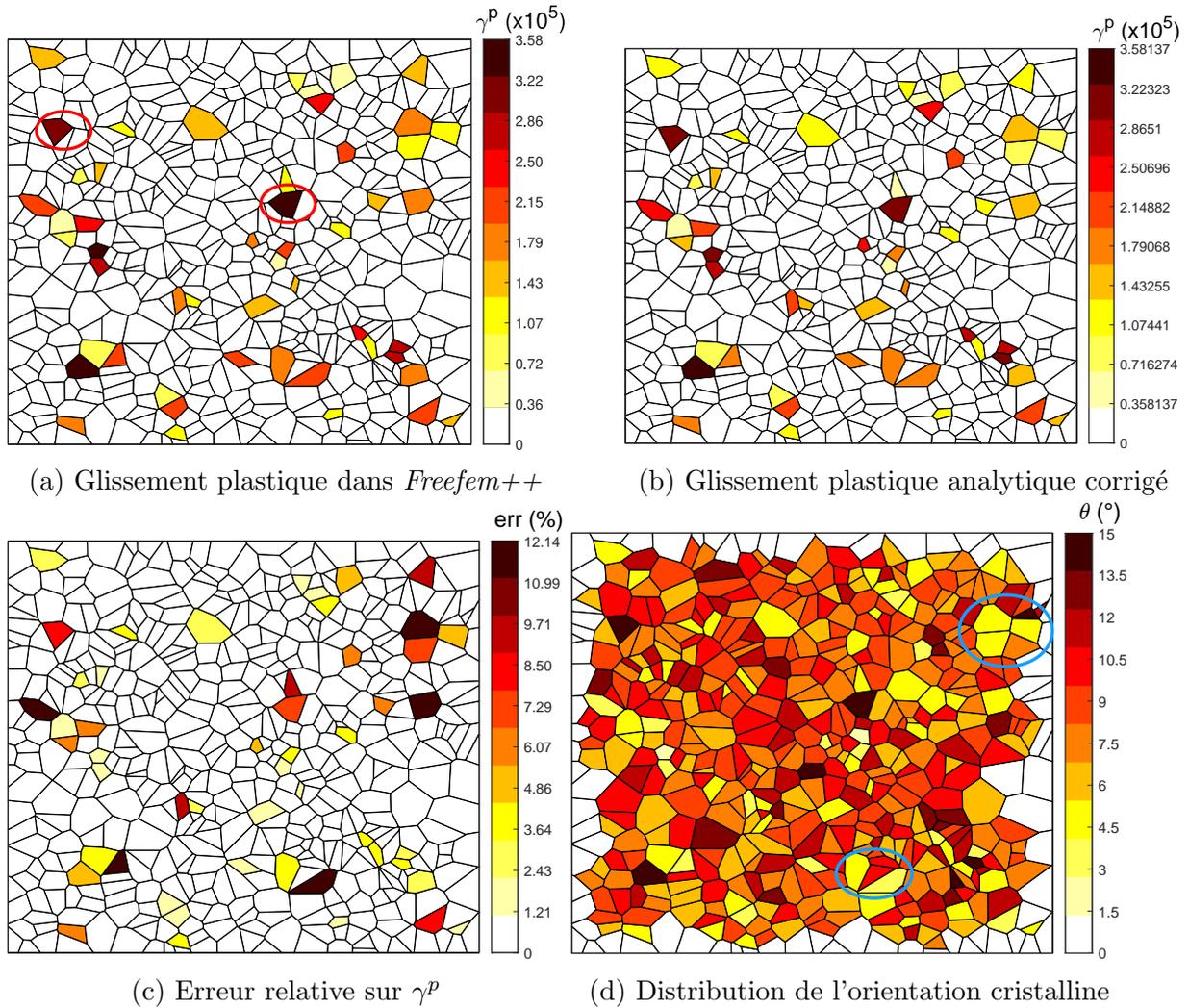


FIGURE 4.9 – Cartes de glissement plastique, orientation et erreur

Sur la figure 4.9d est représentée la distribution d'orientation cristalline dans le polycristal étudié. En comparant les erreurs présentée figure 4.9c aux orientations cristalline des grains (cf. figure 4.9d), on observe que plus l'orientation cristalline des grains voisins est proche de celle du grain critique, plus l'erreur est élevée (voir par exemple les grains entourés en bleu sur la figure 4.9c). Dans ce cas la correction du glissement plastique nécessite un calcul d'interaction complet, c'est-à-dire la résolution du problème complexe (4.20).

Les erreurs sur les grains critiques sont acceptables ($\leq 5\%$) et les corrections sur les interactions entre les grains diminuent l'erreur calculée (de 84% dans l'exemple ci-dessus). En se limitant aux grains critiques de la tessellation et aux grains bien approchés par des ellipses, on constate que le modèle mésoscopique pour les polycristaux à interaction faible est valide.

4.7 Conclusion

Pour un polycristal, l'interaction entre grains voisins joue un rôle important vu que le champ de contrainte généré par un grain s'étend aux grains voisins et influence leurs glissements plastiques. Dans la méthodologie suivie, cette interaction a été prise en compte en introduisant des coefficients α_{kl} qui dépendent des paramètres du matériau et de la taille des grains. En se plaçant dans l'hypothèse d'interaction faible, on parvient à obtenir des expressions analytiques permettant de calculer les glissements plastiques dans les différents grains, dans l'esprit des formules présentées au chapitre précédent. Ces expressions permettent de calculer très rapidement l'évolution d'un polycristal au cours d'un grand nombre de cycles. La méthode proposée est ainsi adaptée pour réaliser des études probabilistes en fatigue nécessitant de calculer l'évolution plastique pour un grand nombre de microstructures générées aléatoirement. Le modèle présenté a été validé par éléments finis dans le cas simple de deux grains noyés dans une matrice élastique puis dans le cas complexe d'une tessellation entière. La première validation a mis en évidence l'importance de la correction sur les grains voisins et la robustesse du modèle à interaction faible. La validation dans le deuxième cas a confirmé ces dernières conclusions et a prouvé que les erreurs sur les grains critiques sont acceptables.

Chapitre 5

Formulations directes et critère de fatigue

Sommaire

5.1	Introduction	66
5.2	Approche directe pour un chargement cyclique	67
5.2.1	État asymptotique pour un chargement cyclique	67
5.2.2	Validation par le modèle mésoscopique	70
5.3	Application statistique des formules directes	71
5.3.1	Critère de fatigue mésoscopique	71
5.3.2	Influence de la forme du grain	72
5.3.3	Influence de l'orientation cristalline	74
5.3.4	Aspects probabilistes	76
5.4	Conclusion	81

5.1 Introduction

Dans les chapitres précédents on a mis en place et validé un modèle mésoscopique rapide pour les polycristaux, permettant de relier les paramètres de la microstructure au taux de glissement plastique pour un cycle de chargement donné. Dans ce chapitre, on montre qu'il est possible d'obtenir des formules directes donnant les valeurs stabilisées du glissement plastique et du glissement plastique cumulé dans le cas particulier des grains isolés. Ces formules directes sont validées par comparaison avec le calcul incrémental. On les utilise pour évaluer l'influence de la forme du grain et de l'orientation cristalline sur la durée de vie en fatigue dans le cadre d'une étude statistique préliminaire.

5.2 Approche directe pour un chargement cyclique

La méthode présentée dans le chapitre précédent permet d'estimer l'évolution incrémentale des glissements plastiques pour un historique de chargement donné. Dans ce chapitre, nous considérons un chargement cyclique périodique et nous nous intéressons à l'état asymptotique atteint par le polycristal lorsque le nombre de cycles croît à l'infini. Dans la situation où l'on néglige les interactions entre grains, nous montrons qu'il est possible d'obtenir directement les valeurs asymptotiques des glissements plastiques (et des glissements plastiques cumulés) dans chaque grain, sans avoir besoin d'effectuer les calculs cycle par cycle.

5.2.1 État asymptotique pour un chargement cyclique

Si l'on néglige les interactions élastiques, les grains critiques évoluent de façon indépendantes les uns des autres. Dans la suite, nous considérons un grain critique particulier dont on note γ^p le glissement plastique et η^p le glissement plastique cumulé et $(\underline{n}_s, \underline{t}_s)$ le système de glissement actif (avec $1 \leq s \leq M$), ainsi que $\mathbf{m}_s = \frac{1}{2}(\underline{n}_s \otimes \underline{t}_s + \underline{t}_s \otimes \underline{n}_s)$ le cisaillement résolu. Le problème incrémental définissant l'évolution de γ^p correspond à celui présenté au chapitre 3.

Nous considérons un chargement macroscopique proportionnel de la forme :

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}(t) = f(t)\boldsymbol{\sigma}^0, \quad (5.1)$$

où $\boldsymbol{\sigma}^0$ est indépendant du temps et $f(t)$ alterne entre une valeur minimale f_{min} et une valeur maximale f_{max} . Pour fixer les idées, on suppose que $f(0) = f(T) = f_{min}$ et $f(T/2) = f_{max}$ où T est la période du chargement. La fonction f est monotone et croissante (resp. décroissante) sur l'intervalle de temps $[0, T/2]$ (resp. $[T/2, T]$) et on s'attend à ce que le glissement plastique γ^p présente un comportement similaire. Cela motive le calcul de l'évolution de γ^p en résolvant le problème incrémental (5.2) sur chacun des demi-cycles $[nT, nT + T/2]$ et $[nT + T/2, (n + 1)T]$.

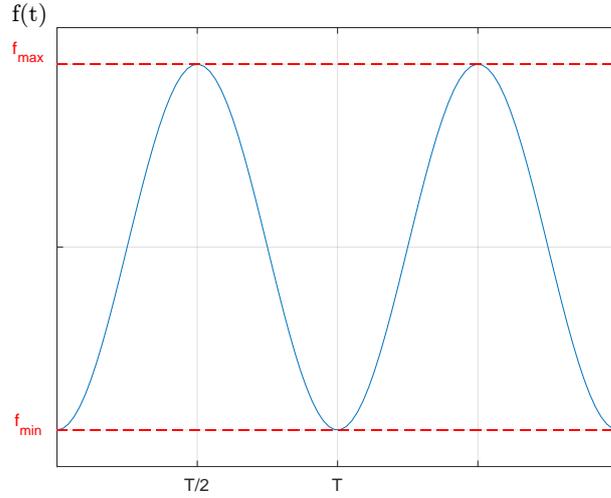


FIGURE 5.1 – Fonction $f(t)$ du chargement appliqué aux frontières du VER.

On pose γ_n^p (resp. $\gamma_{n+\frac{1}{2}}^p$) la valeur de γ^p à l'instant nT (resp $nT + T/2$). De même, nous notons η_n^p et $\eta_{n+\frac{1}{2}}^p$ les glissements plastiques cumulés aux temps nT et $nT + T/2$. Enfin, nous désignons par τ_n (resp. $\tau_{n+\frac{1}{2}}$) la valeur de la contrainte de cisaillement critique actualisée à l'instant nT (resp $nT + T/2$), i.e. $\tau_n = \tau_0 + \xi\eta_n^p$ (resp $\tau_{n+\frac{1}{2}} = \tau_0 + \xi\eta_{n+\frac{1}{2}}^p$). On obtient à partir de (3.36) :

$$\gamma_{n+\frac{1}{2}}^p = \begin{cases} \gamma_n^p & \text{si } |\bar{\beta}_{n+\frac{1}{2}} - \alpha\gamma_n^p| \leq \tau_n \\ \frac{\bar{\beta}_{n+\frac{1}{2}} + \xi\gamma_n^p - \tau_n}{\alpha + \xi} & \text{si } \bar{\beta}_{n+\frac{1}{2}} - \alpha\gamma_n^p > \tau_n \end{cases}, \quad (5.2)$$

Où $\beta_{n+\frac{1}{2}} = f_{max} \sigma^0 : \mathbf{m}$ et :

$$\gamma_{n+1}^p = \begin{cases} \gamma_{n+\frac{1}{2}}^p & \text{si } |\bar{\beta}_{n+1} - \alpha\gamma_{n+\frac{1}{2}}^p| \leq \tau_{n+\frac{1}{2}} \\ \frac{\bar{\beta}_{n+1} + \xi\gamma_{n+\frac{1}{2}}^p + \tau_{n+\frac{1}{2}}}{\alpha + \xi} & \text{si } \bar{\beta}_{n+1} - \alpha\gamma_{n+\frac{1}{2}}^p > \tau_{n+\frac{1}{2}} \end{cases}, \quad (5.3)$$

Où $\beta_{n+1} = f_{min} \sigma^0 : \mathbf{m}$.

Les formules (5.2) et (5.3) donnent une relation de récurrence pour calculer les glissements plastiques $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n$. Considérons le cas où l'adaptation se produit, c'est-à-dire que le glissement plastique converge vers une valeur γ_∞^p indépendante du temps lorsque le temps tend vers l'infini. En prenant la limite $n \rightarrow +\infty$ dans les équations (5.2) et (5.3), et en supposant un écoulement plastique sur chaque demi-cycle, nous obtenons les relations suivantes :

$$\begin{cases} \gamma_\infty^p = \frac{f_{max} \sigma^0 : \mathbf{m} + \xi\gamma_\infty^p - \tau_\infty}{\alpha + \xi}, \\ \gamma_\infty^p = \frac{f_{min} \sigma^0 : \mathbf{m} + \xi\gamma_\infty^p + \tau_\infty}{\alpha + \xi}, \end{cases} \quad (5.4)$$

où τ_∞ et η_∞^p sont les valeurs asymptotiques du cisaillement critique et du glissement plastique cumulé, données par :

$$\begin{cases} \tau_\infty &= \tau_0 + \xi \eta_\infty^p \\ \eta_\infty^p &= \sum_{n=0}^{\infty} (|\gamma_{n+1}^p - \gamma_{n+\frac{1}{2}}^p| + |\gamma_{n+\frac{1}{2}}^p - \gamma_n^p|). \end{cases} \quad (5.5)$$

Il vient donc les relations suivantes :

$$\gamma_\infty^p = \boldsymbol{\sigma}^0 : \mathbf{m} \frac{f_{max} + f_{min}}{2\alpha}, \quad \tau_\infty = \boldsymbol{\sigma}^0 : \mathbf{m} \frac{f_{max} - f_{min}}{2} \quad (5.6)$$

À partir desquelles on obtient la valeur de η_∞^p telle que :

$$\eta_\infty^p = \frac{1}{\xi} \left(\frac{f_{max} - f_{min}}{2} \boldsymbol{\sigma}^0 : \mathbf{m} - \tau_0 \right). \quad (5.7)$$

Les expressions obtenues pour γ_∞^p et η_∞^p peuvent être réécrites de manière plus compacte :

$$\gamma_\infty^p = \frac{\sigma_{nt}^m}{\alpha} \text{ et } \eta_\infty^p = \frac{\sigma_{nt}^a - \tau_0}{\xi} \quad (5.8)$$

Où :

$$\sigma_{nt}^m = \frac{f_{max} + f_{min}}{2} \boldsymbol{\sigma}^0 : \mathbf{m} \text{ et } \sigma_{nt}^a = \frac{f_{max} - f_{min}}{2} \boldsymbol{\sigma}^0 : \mathbf{m} \quad (5.9)$$

sont respectivement la moyenne et l'amplitude de la contrainte macroscopique résolue $f(t)\boldsymbol{\sigma}^0 : \mathbf{m}$.

La formule (5.8) montre qu'il existe une relation simple entre les paramètres de chargement et les variables d'état plastique dans l'état d'adaptation. Cependant, il y a certaines restrictions sur les paramètres de chargement pour que cette formule s'applique. Nous avons en effet :

$$|\gamma_\infty^p| = \left| \sum_{n=0}^{\infty} (\gamma_{n+1}^p - \gamma_{n+\frac{1}{2}}^p) + (\gamma_{n+\frac{1}{2}}^p - \gamma_n^p) \right| \leq \sum_{n=0}^{\infty} (|\gamma_{n+1}^p - \gamma_{n+\frac{1}{2}}^p| + |\gamma_{n+\frac{1}{2}}^p - \gamma_n^p|) = \eta_\infty^p \quad (5.10)$$

Ceci implique que l'équation (5.8) n'est valable que si :

$$\frac{|\sigma_{nt}^m|}{\alpha_k} \leq \frac{\sigma_{nt}^a}{\xi} \quad (5.11)$$

Lorsque les paramètres de chargement ($\sigma_{nt}^m, \sigma_{nt}^a$) ne satisfont pas cette condition, on constate que l'adaptation se produit après un nombre fini de cycles. Il n'existe pas de formule directe pour estimer l'état d'adaptation dans ce cas.

5.2.2 Validation par le modèle mésoscopique

Afin de valider les expressions dans (5.8), nous procédons à une comparaison avec un calcul cycle par cycle utilisant le modèle mésoscopique itératif (4.22). On se place dans la situation où le chargement vérifie la condition (5.11). La comparaison est effectuée pour un grain aléatoire généré dans une matrice élastique soumise à un cisaillement pur cyclique, c'est-à-dire $\boldsymbol{\sigma}^0 = (\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_2 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_1)$. Les paramètres du matériau et du chargement sont reportés dans le tableau ci-dessous.

E (GPa)	ν	f_{max} (MPa)	f_{min} (MPa)	ζ (MPa ⁻¹)	τ_0 (MPa)
210	0.3	151	-51	$5 \cdot 10^{-2}$	90

TABLE 5.1 – Paramètres du matériau et du chargement macroscopique

À la figure 6.2 (courbes bleues) sont tracés le glissement plastique et le glissement cumulé en fonction du nombre de cycles du chargement N_C . Les valeurs analytiques stabilisées correspondant aux expressions (5.8) sont données par les lignes rouges.

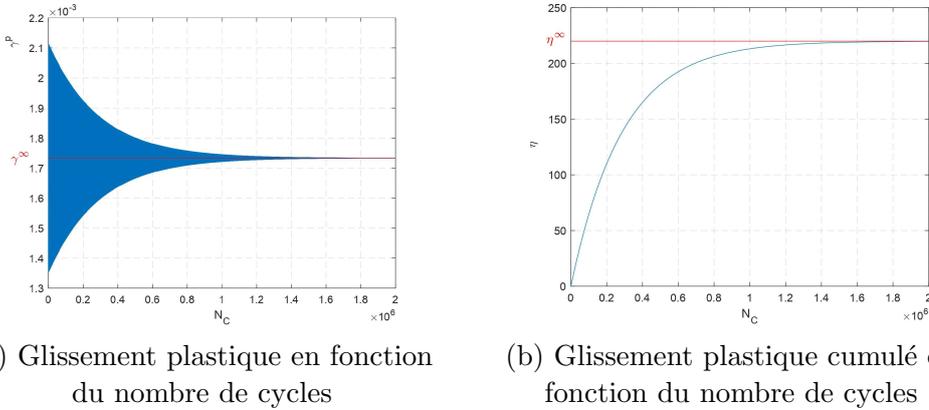


FIGURE 5.2 – Validation par modèle mésoscopique

Comme prévu, (γ^p, η^p) convergent vers les valeurs stabilisées $(\gamma_\infty^p, \eta_\infty^p)$ données par (5.8) pour $N_C \rightarrow \infty$. Pour $N_C \geq 1.1 \cdot 10^6$, la différence relative entre γ^p et γ_∞^p est inférieure à 1%.

La formule (5.8) donne une approche directe pour estimer l'état asymptotique dans chaque grain du polycristal dans le cas où l'interaction est négligée. Cette approche est précieuse pour l'analyse de la fatigue et les études probabilistes, comme illustré dans les sections suivantes.

5.3 Application statistique des formules directes

5.3.1 Critère de fatigue mésoscopique

Les observations expérimentales montrent que les fissures de fatigue apparaissent généralement dans des bandes de glissement persistantes à l'intérieur des grains critiques. Motivés par de telles observations, nous adoptons pour la suite une approche du type plan critique inspiré du critère de Dang Van [46]. Nous considérons alors qu'une fissure de fatigue peut s'initier dans un grain critique donné si $X \geq b$ où :

$$X = \sup_t (\sigma_{nt}(t) + a\sigma_{nn}(t)) \quad (5.12)$$

Et où $a \in [0, 1]$ est un paramètre adimensionnel et b (MPa) est une contrainte positive. Dans (5.12), $\sigma_{nt}(t)$ et $\sigma_{nn}(t)$ sont définis par

$$\sigma_{nt}(t) = \underline{n}_s \cdot \boldsymbol{\sigma}(t) \cdot \underline{t}_s \quad \text{et} \quad \sigma_{nn}(t) = \underline{n}_s \cdot \boldsymbol{\sigma}(t) \cdot \underline{n}_s \quad (5.13)$$

Où \underline{n}_s est la normale au plan de glissement actif, \underline{t}_s est la direction du glissement, et $\boldsymbol{\sigma}(t)$ est la contrainte locale dans le grain. Par conséquent, la durée de vie en fatigue est infinie si :

$$X \leq b \quad (5.14)$$

Une condition similaire à (5.14) est considérée dans le critère de fatigue de Dang Van et également liée aux indicateurs d'endommagement proposés par [114]. Dans la construction originale du critère de fatigue de Dang Van, la contrainte purement élastique dans les grains critiques est approximée en utilisant l'approche de Lin-Taylor et la déformation plastique stabilisée est estimée en utilisant un argument heuristique. L'approche que nous présentons ici permet d'éviter ces hypothèses. Plus précisément, en reprenant les résultats du chapitre 3, lorsque l'adaptation est atteinte dans un grain critique, la contrainte locale prend la forme suivante :

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \bar{\boldsymbol{\sigma}}(t) - \gamma_\infty^p \mathbf{C} : (\mathbf{I} - \mathbf{S}_I) : \mathbf{m}_s \quad (5.15)$$

Où $\bar{\boldsymbol{\sigma}}(t)$ est la contrainte macroscopique, \mathbf{S}_I est le tenseur d'ordre 4 d'Eshelby défini par (3.22). En rappelant que \mathbf{C} est isotrope (avec des coefficients de Lamé (λ, μ)) et en notant que $\underline{n}_s \cdot \underline{t}_s = 0$, nous avons :

$$\sigma_{nt}(t) = f(t)\sigma_{nt}^0 - \alpha'\gamma_\infty^p, \quad \sigma_{nn}(t) = f(t)\sigma_{nn}^0 - \alpha''\gamma_\infty^p \quad (5.16)$$

Où :

$$\begin{cases} \alpha' &= \mu(1 - 2\mathbf{m}_s : \mathbf{S}_I : \mathbf{m}_s) \\ -\alpha'' &= \lambda \text{tr}(\mathbf{S}_I : \mathbf{m}_s) + 2\mu \underline{n}_s \otimes \underline{n}_s : \mathbf{S}_I : \mathbf{m}_s \end{cases} \quad (5.17)$$

Dans (5.16), nous avons posé $\sigma_{nt}^0 = \underline{n}_s \cdot \boldsymbol{\sigma}^0 \cdot \underline{t}_s$ et $\sigma_{nn}^0 = \underline{n}_s \cdot \boldsymbol{\sigma}^0 \cdot \underline{n}_s$. En utilisant l'expression (5.8) de γ_∞^p , on obtient :

$$\sigma_{nt}(t) + a\sigma_{nn}(t) = f(t)(\sigma_{nt}^0 + a\sigma_{nn}^0) - (\alpha' + a\alpha'') \frac{\sigma_{nt}^m}{\alpha' + \xi_X} \quad (5.18)$$

La valeur de $f(t)$ atteignant le maximum de l'expression ci-dessus est soit f_{max} soit f_{min} , selon le signe de $\sigma_{nt}^0 + a\sigma_{nn}^0$. En posant :

$$\sigma_{nn}^m = \frac{f_{max} + f_{min}}{2} \sigma_{nn}^0 \quad \text{et} \quad \sigma_{nn}^a = \frac{f_{max} - f_{min}}{2} \sigma_{nn}^0 \quad (5.19)$$

nous arrivons à $X = \sup\{X_+, X_-\}$ où :

$$X_\pm = \sigma_{nt}^m + a\sigma_{nn}^m \pm (\sigma_{nt}^a + a\sigma_{nn}^a) - (\alpha' + a\alpha'') \frac{\sigma_{nt}^m}{\alpha' + \xi_X} \quad (5.20)$$

Dans le cas où $\xi_X = 0$ (ce qu'on considère dans la suite), l'expression ci-dessus se simplifie et le critère mésoscopique fatigue devient :

$$X_\pm = \left[a\sigma_{nn}^m \pm (\sigma_{nt}^a + a\sigma_{nn}^a) - a \frac{\alpha''}{\alpha'} \sigma_{nt}^m \right] \leq b \quad (5.21)$$

5.3.2 Influence de la forme du grain

La quantité $X = \sup\{X_+, X_-\}$ détermine la durée de vie en fatigue des grains critiques. Pour un chargement donné, X dépend de la forme des grains critiques par le biais du rapport α''/α' où α' et α'' sont définis dans (5.17). Ce rapport peut être interprété comme un facteur d'amplification géométrique de la contrainte de cisaillement moyenne résolue σ_{nt}^m .

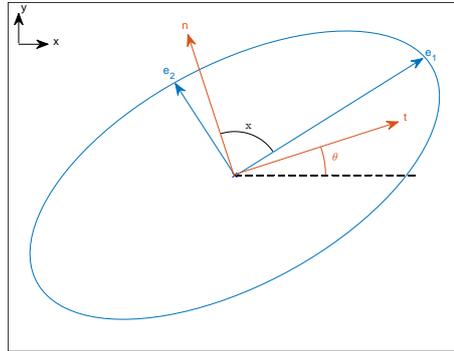


FIGURE 5.3 – Repère de l'ellipse ($O, \underline{e}_1, \underline{e}_2$) et du système de glissement activé ($O, \underline{t}_s, \underline{n}_s$)

L'évaluation de α''/α' nécessite l'évaluation du tenseur \mathbf{S}_I introduit dans (3.20), ce qui ne peut être fait que numériquement en général. Une exception notable est le

cas des grains elliptiques, qu'on considère dans la suite et pour lesquels \mathbf{S}_I coïncide avec le tenseur d'Eshelby. Soit $r \leq 1$ le rapport d'aspect du grain ellipsoïdal et soit x l'angle entre le grand axe du grain et la direction \underline{n}_s du plan de glissement. En utilisant l'expression du tenseur d'Eshelby \mathbf{S}_I (en 2D) (cf. annexe C), on obtient, en omettant le détail des calculs :

$$\frac{-\alpha''}{\alpha'} = \frac{2(1-r)[1+r+(1-r)\cos 2x]\sin 2x}{(1+r)^2 - (1-r)^2 \cos 4x} \quad (5.22)$$

Il est intéressant de constater que le rapport $-\alpha''/\alpha'$ est indépendant des modules élastiques. Le rapport $-\alpha''/\alpha'$ est représenté dans la figure 5.4a en fonction de x , pour plusieurs valeurs du rapport r .

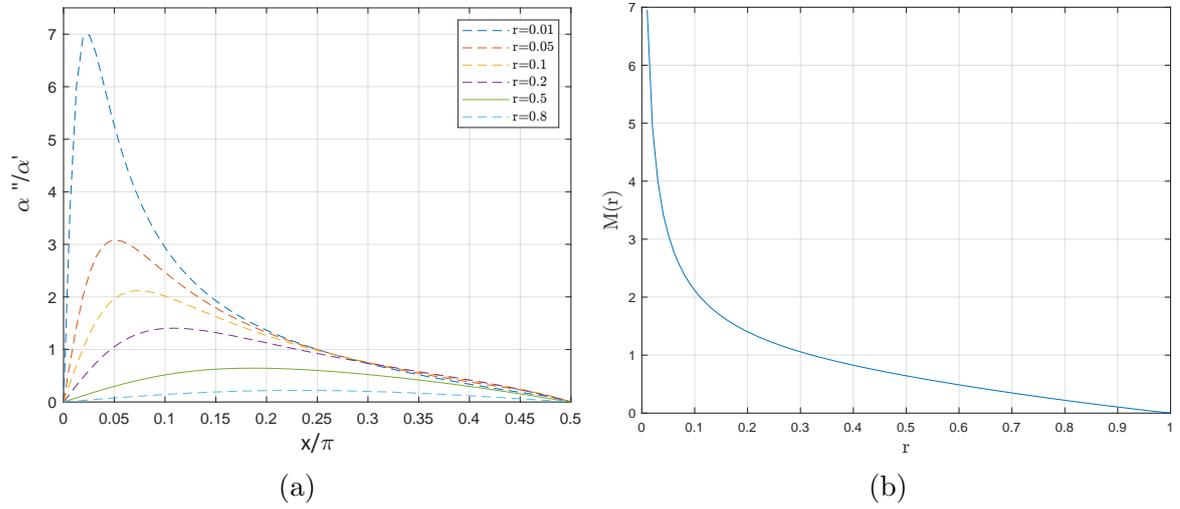


FIGURE 5.4 – Facteur d'amplification géométrique capturant l'influence de la forme du grain (orientation x et rapport d'aspect r) sur l'indicateur de fatigue.

Dans le cas limite $r = 1$ (inclusion circulaire), α''/α' est égal à 0. Dans le cas limite $r = 0$ (grains plats), on obtient $-\alpha''/\alpha' = \cotan x$ qui peut prendre toutes les valeurs dans \mathbb{R} en fonction de l'angle x . En particulier $-\alpha''/\alpha' = +\infty$ lorsque $x = 0$, c'est-à-dire lorsque la normale au plan de glissement est parallèle au grain plat. Plus généralement, pour un rapport d'aspect r donné, on peut facilement voir que $-\alpha''/\alpha'$ est π -périodique et couvre un intervalle de la forme $[-M(r), M(r)]$ lorsque x varie entre 0 et π . La fonction $M(r)$ est tracée à la figure 5.4b et peut être interprétée comme un facteur d'amplification maximal de σ_{nt}^m dans l'indicateur de durée de vie en fatigue X .

L'influence de la forme du grain est corrélée à l'influence de son orientation cristalline. Dans le cas d'un grain circulaire, l'influence de σ_{nt}^m sur la tenue du grain est nulle par raison de symétrie. Dans le cas d'un grain aplati si la normale au plan de glissement est parallèle au grain, ce dernier a une meilleure tenue en fatigue.

5.3.3 Influence de l'orientation cristalline

Pour un rapport d'aspect donné r , nous considérons la situation la plus défavorable où l'angle x donne la plus grande valeur de $|\alpha''/\alpha'|$, de sorte que :

$$X_{\pm} = \sigma_{nt}^m + a\sigma_{nn}^m \pm (\sigma_{nt}^a + a\sigma_{nn}^a) + aM(r)|\sigma_{nt}^m| \quad (5.23)$$

Soit $(\underline{u}_1, \underline{u}_2)$ les directions principales (vecteurs propres) de $\boldsymbol{\sigma}^0$, de sorte que l'on peut écrire $\boldsymbol{\sigma}^0 = \lambda_1 \underline{u}_1 \otimes \underline{u}_1 + \lambda_2 \underline{u}_2 \otimes \underline{u}_2$ avec $\lambda_1 \leq \lambda_2$. L'orientation cristalline peut être paramétrée par l'angle θ tel que $\underline{n} = \cos \theta \underline{u}_1 + \sin \theta \underline{u}_2$ et $\underline{t} = -\sin \theta \underline{u}_1 + \cos \theta \underline{u}_2$. On a alors :

$$X_+ = a(f^m + f^a)(\lambda_2 + (\lambda_1 - \lambda_2)(\cos \theta)^2) + f^a(\lambda_2 - \lambda_1) \sin \theta \cos \theta + aM(r)|f^m|(\lambda_2 - \lambda_1)|\sin \theta \cos \theta| \quad (5.24)$$

Où l'on a posé :

$$f^m = \frac{f_{max} + f_{min}}{2} \quad \text{et} \quad f^a = \frac{f_{max} - f_{min}}{2} \quad (5.25)$$

La valeur la plus critique de X_+ est obtenue par maximisation par rapport à θ . Cette maximisation peut être effectuée en forme fermée, ce qui donne après calculs :

$$\sup_{\theta} X_+ = a(f^m + f^a) \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} + \frac{1}{2}(\lambda_2 - \lambda_1) \sqrt{(f^a + aM(r)|f^m|)^2 + a^2(f^m + f^a)^2} \quad (5.26)$$

Un calcul similaire donne :

$$\sup_{\theta} X_- = a(f^m - f^a) \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} + \frac{1}{2}(\lambda_2 - \lambda_1) \sqrt{(f^a + aM(r)|f^m|)^2 + a^2(f^m - f^a)^2} \quad (5.27)$$

Par conséquent, si :

$$a(f^m \pm f^a) \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} + \frac{1}{2}(\lambda_2 - \lambda_1) \sqrt{(f^a + aM(r)|f^m|)^2 + a^2(f^m \pm f^a)^2} \leq b \quad (5.28)$$

alors un grain critique de rapport d'aspect r satisfait à la condition de durée de vie infinie, quelle que soit son orientation géométrique ou cristalline.

Considérons maintenant un polycristal constitué de grains ellipsoïdaux dont les rapports d'aspect varient dans un intervalle donné $[r_0, r_1]$. En observant que le membre de gauche de (5.28) est croissant avec M et en notant à la figure 5.4b que $M(r)$ est décroissant en fonction de r , on obtient la condition suivante :

$$a(f^m \pm f^a) \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} + \frac{1}{2}(\lambda_2 - \lambda_1) \sqrt{(f^a + aM(r_0)|f^m|)^2 + a^2(f^m \pm f^a)^2} \leq b \quad (5.29)$$

qui assure que tous les grains critiques ont une durée de vie infinie, quelle que soit leur orientation (géométrique et cristalline) et quelle que soit la valeur exacte de leurs rapports d'aspect. La condition (5.29) peut donc être interprétée comme une condition de durée de vie infinie pour le polycristal. On s'attend à ce qu'elle soit représentative des polycristaux qui contiennent de nombreux grains couvrant presque toutes les orientations possibles. Dans ce cas, il y a en effet une forte probabilité qu'il existe un grain critique proche de la pire orientation, ce qui permet d'atteindre la valeur $\max X$ dans (5.29). Pour les polycristaux avec peu de grains ou avec des textures particulières, la condition (5.29) est conservatrice.

Dans cette condition, le seul paramètre lié à la forme des grains est le scalaire $M(r_0)$. La situation la plus favorable correspond aux inclusions circulaires ($r_0 = 1$), auquel cas $M(r_0) = 0$ et (5.29) se réduit à :

$$a(f^m \pm f^a) \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} + \frac{1}{2}(\lambda_2 - \lambda_1) \sqrt{(f^a)^2 + a^2(f^m \pm f^a)^2} \leq b \quad (5.30)$$

L'équation (5.30) est exprimée uniquement en termes de paramètres de chargement macroscopiques. Elle peut être interprétée comme une version à grande échelle de l'expression locale (5.14) utilisée pour les grains individuels. Il est intéressant de comparer (5.29) avec des critères de fatigue macroscopiques couramment utilisés tels que le critère de Crossland, de Sines ou de Dang Van. Pour le chargement considéré, la condition de durée de vie infinie obtenue à partir du critère de Dang Van prend la forme suivante :

$$a_{DV}(f^m \pm f^a) \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} + \frac{1}{2}(\lambda_2 - \lambda_1) f^a \leq b_{DV} \quad (5.31)$$

$$\begin{cases} a_{DV} = 3 \left(\frac{\tau^{-1}}{\sigma^{-1}} - \frac{1}{2} \right) \\ b_{DV} = \tau^{-1} \end{cases} \quad (5.32)$$

où que (τ^{-1}, σ^{-1}) sont respectivement deux limites de fatigue en torsion alternée et en traction alternée.

Il existe une étroite ressemblance entre (5.31) et (5.29), notamment dans le cas des grains circulaires. En particulier, le terme en $(\lambda_1 + \lambda_2)/2$ est le même. On peut observer que la condition (5.30) est plus conservatrice que (5.31) car le facteur multiplicateur de $(\lambda_2 - \lambda_1)/2$ est plus grand.

La condition de durée de vie infinie obtenue à partir de la condition de Crossland et de Sines se lit respectivement comme suit :

$$a_{CR} \left(f^m \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} + f^a \left| \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} \right| \right) + \frac{1}{2}(\lambda_2 - \lambda_1) f^a \leq b_{CR} \quad (5.33)$$

$$a_{Sin} f^m \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} + \frac{1}{2}(\lambda_2 - \lambda_1) f^a \leq b_{Sin} \quad (5.34)$$

Où :

$$\begin{cases} a_{CR} = 3 \left(\frac{\tau^{-1}}{\sigma^{-1}} - \frac{1}{\sqrt{3}} \right) & , & a_{Sin} = 3 \left(\frac{\tau^{-1}}{\sigma^0} - \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \\ b_{CR} = b_{Sin} = \tau^{-1} \end{cases}$$

Et où σ^0 est la limite de fatigue en traction répétée.

Ces deux critères diffèrent de (5.31) par le terme en $(\lambda_1 + \lambda_2)/2$ capturant l'influence de la contrainte hydrostatique. Dans le critère de Dang Van, Crossland et Sines, le terme dans $(\lambda_2 - \lambda_1)/2$ diffère de celui obtenu en (5.30). Le critère mésoscopique dans le cas particulier d'une inclusion elliptique en (5.29) est comparé aux critères classiques de Crossland et Dang Van à la figure 5.5.

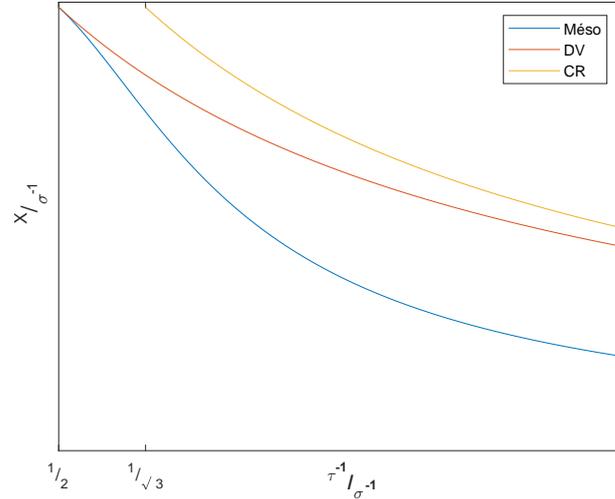


FIGURE 5.5 – Les trois critères de fatigue

On constate que, dans le domaine de validité des trois critères, les critères de fatigue classiques (Crossland, Dang Van) surestiment la limite d'endurance comparé au critère mésoscopique proposé. Cette différence est attribuée au fait que le critère mésoscopique est appliqué au plan critique dans le grain critique du polycristal, limitant ainsi le domaine de sûreté.

5.3.4 Aspects probabilistes

5.3.4.1 Fonction de survie pour un grain critique d'orientation aléatoire

La version stabilisée du modèle mésoscopique présentée ci-dessus nous sert dans cette section pour établir une première analyse probabiliste de la fatigue. On développe ce point pour le cas le plus simple d'un chargement à moyenne nulle (i.e. $f^m = 0$).

Dans ce cas, nous avons grâce à (5.24) :

$$X_+ = -X_- = af^a(\lambda_2 + (\lambda_1 - \lambda_2)(\cos \theta)^2) + f^a(\lambda_2 - \lambda_1) \sin \theta \cos \theta \quad (5.35)$$

Où nous rappelons que θ est l'orientation du système de glissement actif. L'angle θ dépend de l'orientation cristalline Θ dans le grain critique, comme le montre la figure 5.6b pour le cas des 6 systèmes de glissement listés dans (3.43). Afin de simplifier les calculs qui suivent on pose $\Theta' = \Theta + \frac{\pi}{12}$ comme illustré à la figure 5.6a.

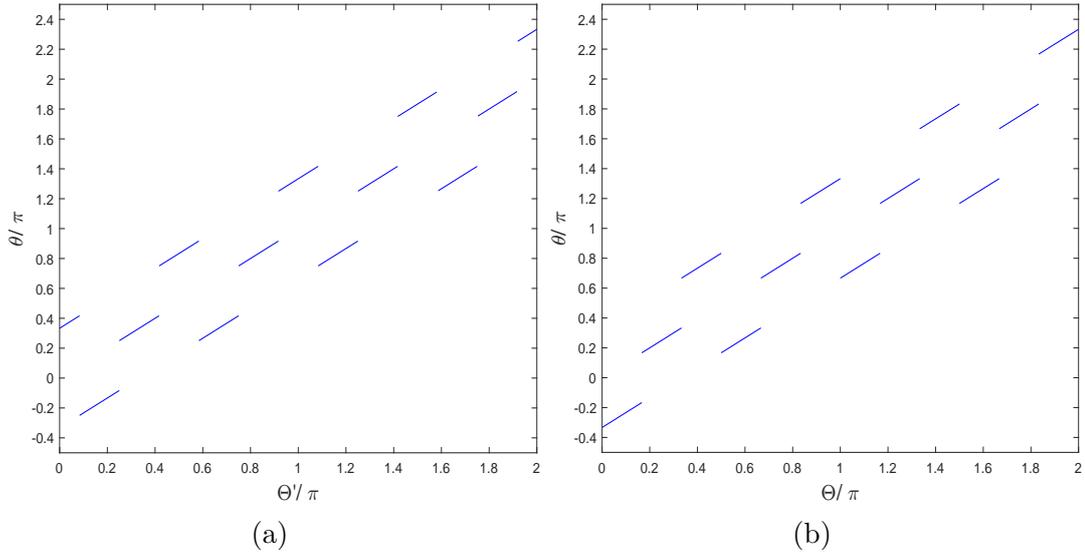


FIGURE 5.6 – Angle θ du système de glissement actif en fonction de l'orientation cristalline Θ .

Dans ce cas, on peut conclure que $\theta = \Theta - \pi/3$ si $0 \leq \Theta \leq \pi/6$ (modulo $\pi/2$), $\theta = \Theta$ si $\pi/6 \leq \Theta \leq \pi/3$ (modulo $\pi/2$), $\theta = \Theta + \pi/3$ si $\pi/3 \leq \Theta \leq \pi/2$ (modulo $\pi/2$). En fixant $\psi = \arctan(1/a)$, et après quelques calculs simples on obtient :

$$\frac{X_+}{f^a} = a \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} + \sqrt{1 + a^2} \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{2} y \quad (5.36)$$

Où l'on a posé :

$$y = \cos(2\theta + \psi) \quad (5.37)$$

A condition que $\pi/6 \leq \psi \leq \pi/3$ (ce qui correspond à $a \in [1/\sqrt{3}, \sqrt{3}]$), y prend des valeurs dans $[-y_2, -y_1] \cup [y_1, y_2]$ où :

$$y_1 = \cos(\psi - \frac{2\pi}{3}) \quad \text{et} \quad y_2 = \cos(\psi - \frac{\pi}{3}) \quad (5.38)$$

Si maintenant on considère Θ comme une variable aléatoire avec une densité de probabilité prescrite, alors les relations (5.36) et (5.37) permettent de calculer les densités

de probabilité de y et de $X = \max(X_+, X_-)$. Dans le cas particulier où Θ est uniformément distribué sur $[0, 2\pi]$, on trouve que la variable y a une densité de probabilité p donnée par :

$$p(y) = \begin{cases} \frac{3}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{1-y^2}} & \text{si } |y| \in [y_1, y_2] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (5.39)$$

La densité de probabilité p de (5.39) est représentée à la figure 5.7 (courbe rouge).

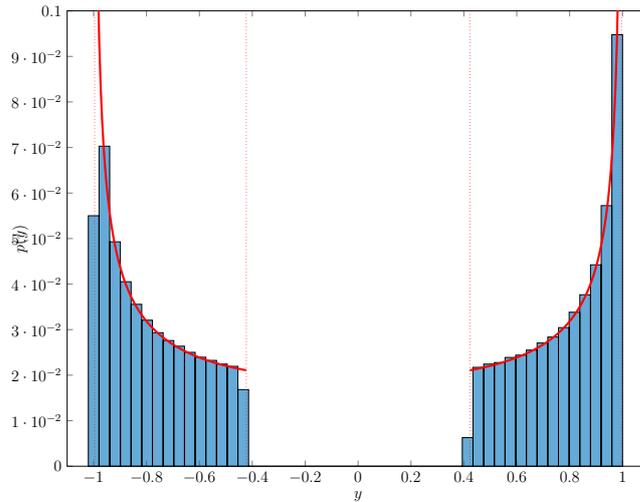


FIGURE 5.7 – La densité de probabilité de y approximée à partir d'un échantillon de 1 000 000 orientations cristallines

Les lignes verticales en pointillés montre le support de p . L'histogramme montre la densité de probabilité approximée à partir d'un échantillon de 1000000 orientations cristallines générées aléatoirement. Cet histogramme est en bon accord avec (5.39). La densité de probabilité de X peut être obtenue à partir de (5.39) et de la relation (5.35). On s'intéresse particulièrement à la fonction de survie de X , définie comme la probabilité que $X \leq b$ lorsque f^a est prescrite. Cette quantité est notée $S(f^a)$ dans ce qui suit. Elle peut être interprétée comme la probabilité de durée de vie infinie d'un grain critique d'orientation aléatoire soumis à une amplitude de chargement f^a . L'équation (5.36) montre que la condition $X \leq b$ est équivalente à :

$$\frac{1}{B} \left(A - \frac{b}{f_a} \right) \leq y \leq \frac{1}{B} \left(A + \frac{b}{f_a} \right) \quad (5.40)$$

Où :

$$A = a \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2}, \quad B = \sqrt{1 + a^2} \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{2} \quad (5.41)$$

Il vient donc :

$$S(f^a) = \int_{\frac{A-b/f^a}{B}}^{\frac{A+b/f^a}{B}} p(y) dy \quad (5.42)$$

En utilisant l'expression (5.39) pour la densité de probabilité p , l'évaluation de l'intégrale dans (5.42) s'avère assez simple. Le résultat dépend du mode de chargement σ^0 dans (5.1) à travers les paramètres (A, B) dans (5.41) car ces deux paramètres sont fonctions des valeurs propres (λ_1, λ_2) de σ^0 . Considérons d'abord le cas du cisaillement pur, c'est-à-dire que $\sigma^0 = (\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_2 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_1)/2$. Dans ce cas, nous avons $A = 0$, $B = \sqrt{1 + a^2}$ et nous obtenons

$$S(f^a) = \begin{cases} 0 & \text{si } f^a \geq \frac{b}{y_1 \sqrt{1 + a^2}} \\ \frac{1}{2} + \frac{3}{\pi} (\arcsin(\frac{b}{f^a \sqrt{1 + a^2}}) - \psi) & \text{si } \frac{b}{y_2 \sqrt{1 + a^2}} \leq f^a \leq \frac{b}{y_1 \sqrt{1 + a^2}} \\ 1 & \text{si } f^a \leq \frac{b}{y_2 \sqrt{1 + a^2}} \end{cases} \quad (5.43)$$

La fonction de survie donnée par (5.42) est tracée à la figure 5.8 pour le cas $a = 0.7$.

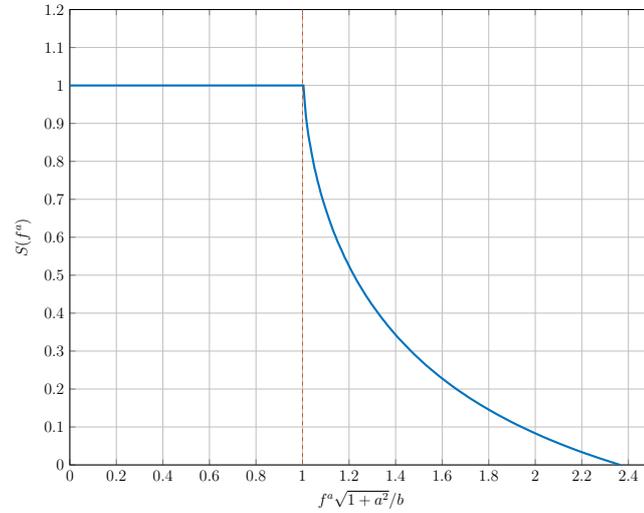


FIGURE 5.8 – Fonction de survie pour un grain critique d'orientation aléatoire. Cas où $f^m = 0$, $\sigma^0 = (\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_2 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_1)/2$ et $a = 0.7$.

Pour tout k donné dans $[0, 1]$, nous désignons par f_k^a l'amplitude de chargement maximale f^a telle que $S(f^a) = k$.

On peut vérifier à partir de (5.43) que le chargement médian de survie $f_{50\%}^a$ (c'est-à-dire le chargement f^a correspondant à une probabilité de survie de 50%) est égal à b .

La valeur $f_{100\%}^a$ (correspondant à une durée de vie infinie garantie) est égale à $b/y_2 \sqrt{1 + a^2}$

avec $y_2 \simeq 0.996$ pour le cas $a = 0.7$ (le cas représenté à la figure 5.8).

Il est intéressant de comparer cette valeur avec la valeur maximale f_{meso}^a correspondant à une durée de vie infinie dans le critère de fatigue mésoscopique (5.29). Pour le chargement considéré, nous obtenons de (5.29) que $f_{meso}^a = b/\sqrt{1+a^2}$ qui est légèrement inférieure à $f_{100\%}^a$. La raison en est que l'équation (5.29) a été obtenue en permettant à l'orientation θ du système de glissement actif de prendre n'importe quelle valeur dans $[0, 2\pi]$, ce qui n'est en fait pas le cas comme le montre la figure 5.6b. Cependant, la différence relative entre $f_{100\%}^a$ et f_{meso}^a est faible dans le cas $a = 0.7$. On peut vérifier que cela reste vrai pour toute valeur de a dans $[0, 1]$.

La fonction de survie d'un grain critique soumis à un chargement donné est connue une fois la densité de probabilité de son orientation cristalline déterminée. Un lien direct est ainsi établi entre le paramètre mésoscopique de distribution d'orientation cristalline et la probabilité de survie du grain dans le cas simple où l'interaction est négligeable.

5.3.4.2 Fonction de survie pour un VER avec M_C grains critiques

Considérons maintenant un VER contenant M_C grains critiques et soumis à un chargement macroscopique donné (f^m, f^a, σ^0) . Le VER survit (c'est-à-dire a une durée de vie infinie) si tous ses grains critiques survivent. Si les orientations cristallines dans les grains critiques sont des variables statiquement indépendantes, la fonction de survie S_{meso} du VER est :

$$S_{meso} = S^{M_C} \quad (5.44)$$

Dans (5.44), on suppose implicitement que tous les grains critiques ont la même fonction de survie S , ce qui est notamment le cas si $f^m = 0$.

Pour un chargement de cisaillement à valeur moyenne nulle ($\sigma^0 = (\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_2 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_1)/2$, $f^m = 0$), il découle de (5.43) et (5.44) que l'amplitude de chargement $f_{50\%}^a$ correspondant à une probabilité de survie de 50% pour le VER de :

$$\frac{b}{\sqrt{1+a^2}} \frac{1}{\sin(\psi + \frac{\pi}{6}(2^{1-\frac{1}{M_C}} - 1))} \quad (5.45)$$

La valeur $f_{50\%}^a$ donnée par (5.45) est représentée à la figure 5.9 en fonction du nombre M_C de grains critiques. On peut vérifier que $f_{50\%}^a$ converge vers $b/y_2\sqrt{1+a^2} \simeq f_{meso}^a$ lorsque $M_C \rightarrow \infty$. Cela signifie que le critère mésoscopique (5.29) est un bon indicateur de fatigue pour les VER avec de nombreux grains critiques. En effet, 20 grains critiques sont suffisants pour que la différence relative entre $f_{50\%}^a$ et f_{meso}^a soit

inférieure à 1%. En revanche, pour un VER avec un petit nombre (< 10) de grains critiques, $f_{50\%}^a$ peut être significativement plus grand que f_{meso}^a . Une telle situation peut se produire pour des structures avec de grands gradients de contrainte. Dans ce cas, le champ de contrainte varie rapidement dans l'espace, ce qui impose au VER d'être petit [115, 50], réduisant ainsi le nombre potentiel de grains critiques. Ceci est en accord avec l'observation expérimentale que les limites de fatigue augmentent généralement en présence de gradients de contrainte locaux.

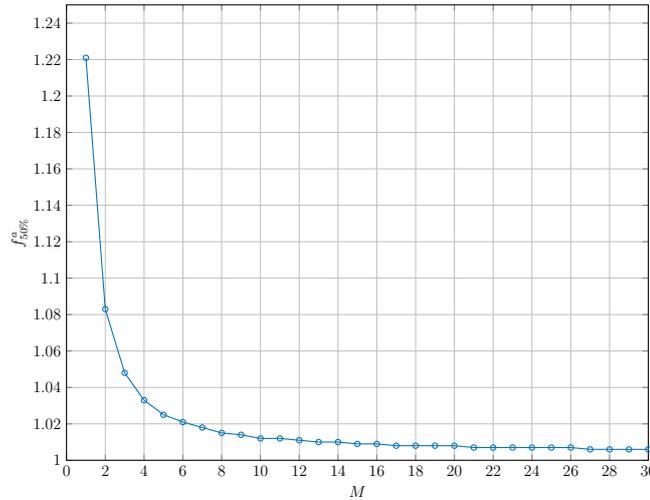


FIGURE 5.9 – Amplitude médiane de chargement $f_{50\%}^a$ pour un VER avec M_C grains critiques. Cas où $f^m = 0$, $\sigma^0 = (\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_2 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_1)/2$ et $a = 0.7$.

La fonction de survie devient dépendante du nombre des grains à l'échelle du polycristal et prouve que pour des VER de plus 20 grains la probabilité qu'un grain critique ait l'orientation la plus défavorable vis à vis du chargement est presque garantie. Le choix d'un VER à nombre de grains représentatif s'avère ainsi nécessaire dans le cas de gradients de contrainte.

5.4 Conclusion

Ce chapitre a introduit des formules analytiques directes dans le cas où les interactions ne sont pas considérées. Il a aussi exploré l'utilité de ces formules couplées à un critère de fatigue mésoscopique inspiré de celui de Dang Van en réalisant une première étude probabiliste. Cette dernière a permis d'examiner l'impact de quelques paramètres microscopiques tels que la taille, la forme du grain et son orientation cristalline. Nous avons constaté que les formes particulières des grains jouent un rôle significatif dans leur tenue en fatigue par le biais d'un facteur multiplicateur dans l'indicateur de durée de vie en fatigue. Nous avons aussi établi une fonction de survie

pour un seul grain critique à orientation aléatoire afin d'évaluer sa tenue en fatigue en fonction de son orientation cristalline. On a aussi établi une fonction de survie à l'échelle du polycristal, permettant de mettre en évidence l'influence du nombre de grains composant un volume élémentaire représentatif.

Chapitre 6

Modèle mésoscopique pour les cristaux à trois phases d'écroûissage

Sommaire

6.1	Introduction	83
6.2	Modèle d'écroûissage à trois phases	84
6.2.1	Minimisation de l'énergie incrémentale	87
6.2.2	Cas sans interaction	88
6.2.3	Cas des interactions faibles	89
6.2.4	Critère de fatigue et de rupture	92
6.3	Résultats et discussion	93
6.3.1	Validation des formules stabilisées	93
6.3.2	Comparaison à la loi d'écroûissage linéaire	93
6.3.3	Analyse de sensibilité	95
6.4	Conclusion	107

6.1 Introduction

Le modèle mésoscopique étant validé (par comparaison avec les calculs EF), nous cherchons ici à l'étendre à des lois de comportement plus complexes. En effet, les lois d'écroûissage simples considérées précédemment ne permettent pas de capturer le véritable comportement des grains aux sein d'un polycristal. Dans ce chapitre, on présente un modèle d'écroûissage plus réaliste, reproduisant 3 phases successives dans l'évolution de la limite élastique avec le glissement plastique cumulé : une phase de durcissement, suivie d'une phase de saturation puis d'une phase d'adoucissement. On étend le modèle mésoscopique à cette nouvelle loi, en généralisant les expressions de

l'énergie incrémentale et de la solution explicite dans les cas sans interaction et avec interaction faible. Après avoir complété ce modèle par des critères de fatigue issus de la littérature, ce chapitre se termine par une analyse de sensibilité de la durée de vie par rapport aux paramètres microstructuraux.

6.2 Modèle d'écroissage à trois phases

Dans le cas général, l'évolution de la limite d'élasticité en fonction du glissement plastique cumulé est composée d'une phase de durcissement (*Phase I*) dans laquelle la limite d'élasticité atteint son maximum τ_{lim} , d'une phase intermédiaire de saturation (*Phase II*) sur laquelle la limite d'élasticité reste constante et enfin d'une phase d'adoucissement (*Phase III*) qui donne le glissement plastique cumulé pour lequel la limite d'élasticité s'annule et le cristal est alors rompu. Une façon simple de modéliser ce comportement est de considérer une loi d'écroissage linéaire par morceaux [116, 45], comme schématisé sur la figure 6.1. Les phases I et II sont alors caractérisées par des pentes g et $-h$, ainsi que les valeurs (η_I, η_{II}) marquant la transition entre les 3 phases.

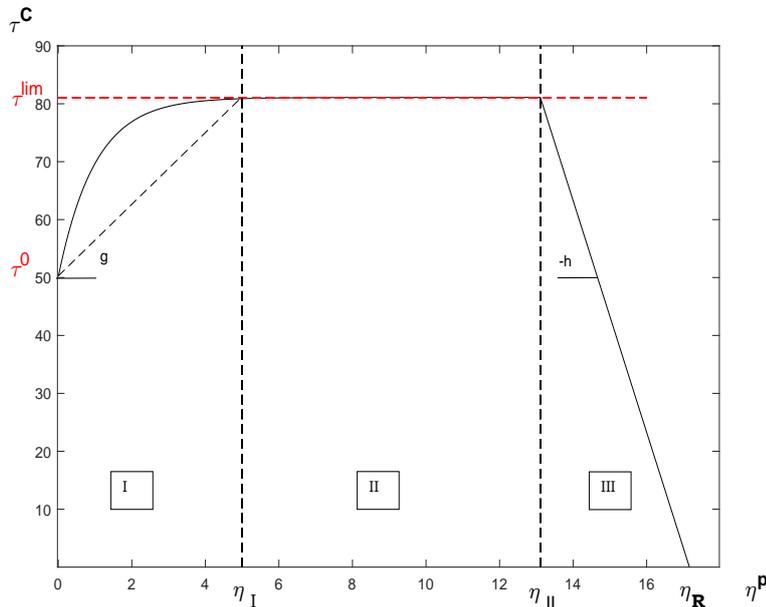


FIGURE 6.1 – Évolution de la limite d'élasticité du cristal en fonction du glissement plastique cumulé.

Cependant, on cherche ici à décrire les phases I et II à l'aide d'un modèle fondé sur l'analyse des dislocations. En conservant l'hypothèse de niveau de chargement faible, on a un nombre limité de grains qui plastifient chacun suivant un seul système

de glissement. Á l'échelle microscopique, ce glissement plastique est une conséquence directe des mouvements des dislocations. On prend alors en compte ces mouvements dans l'expression de la contrainte de cisaillement résolue critique (CRSS : "Critical resolved shear stress") – la contrainte critique de cisaillement résolue dans le sens du glissement – sous forme d'un terme dû au durcissement associé aux interactions entre les dislocations [117, 118]. On a pour chaque grain :

$$\tau_C = \tau_0 + \mu b \sqrt{\alpha \rho} \quad (6.1)$$

avec τ_0 (en MPa) est la contrainte de cisaillement critique résolue initiale avant le glissement plastique du grain, b (en mètre) la norme du vecteur de Burger, α un coefficient de durcissement sans dimension, et ρ (en m^{-2}) la densité de dislocation dans le grain considéré (définie comme la longueur totale de dislocation par unité de volume). Cette densité totale de dislocations ρ est considérée sur le système de glissement actif et divisée en deux catégories : les mobiles et les immobiles. Les dislocations mobiles ρ^m sont celles qui génèrent la déformation plastique et se forment à partir de segments de dislocations ancrés aux extrémités [117, 118]. Les dislocations immobiles ρ^i , quant à elles, sont présentes dans tous les métaux fabriqués industriellement et leur nombre augmente pendant la déformation plastique. Cela se produit parce qu'une fois qu'une dislocation mobile a été générée et déplacée, elle s'arrête et devient immobile. L'évolution de la densité totale de dislocations est définie comme suit :

$$\dot{\rho} = \dot{\rho}^i + \dot{\rho}^m. \quad (6.2)$$

En adoptant le modèle de Tabourot [119] l'évolution de la densité de dislocations est donnée par :

$$\dot{\rho} = \frac{\dot{\eta}^p}{b} \left(\frac{\sqrt{\rho}}{K} - 2y_c \rho \right), \quad (6.3)$$

Où K est un coefficient sans dimension, y_c (m) est une distance d'annihilation entre les dislocations, et η^p est le glissement plastique cumulé. Nous supposons que le glissement plastique initial et la densité de dislocation initiale sont négligeables. Ainsi, initialement $1 - 2K y_c \sqrt{\rho} > 0$ pour $\rho = \rho_{\text{ini}} \approx 0$. Ensuite, $\rho > 0$ augmente et est limité par $\rho_{\text{max}} = 1/(2K y_c)^2$. Par conséquent, $1 - 2K y_c \sqrt{\rho} > 0$, et une intégration directe de (6.3) donne :

$$\eta^p = -\frac{b}{y_c} \ln(1 - 2K y_c \sqrt{\rho}). \quad (6.4)$$

En inversant (6.4) et en injectant dans (6.1), on obtient :

$$\tau_C = \tau_0 + \mu \zeta (1 - \exp((-x \eta^p))), \quad (6.5)$$

Où :

$$x = \frac{y_c}{b} \quad (6.6)$$

et

$$\zeta = \frac{\sqrt{\alpha}}{2 K x} \quad (6.7)$$

sont des coefficients sans dimension. La contrainte de cisaillement critique initiale τ_0 dépend en réalité de la taille des grains. En effet plus la taille des grains est petite plus la contrainte critique en cisaillement est importante, l'effet Hall-Petch [120, 121] capture ce comportement spécifique et donne la relation suivante :

$$\tau_0 = \tau_{\min} \left(1 + \frac{\xi_D}{\sqrt{D}} \right), \quad (6.8)$$

où D est le diamètre équivalent du grain considéré, τ_{\min} (en MPa) est la contrainte de cisaillement critique minimale (c'est-à-dire pour une taille de grain infinie), et ξ_D un coefficient sans dimension qui dépend du matériau.

La loi exponentielle donnée par (6.5) est représentée à la figure 6.1. Elle est utilisée dans la suite pour modéliser à la fois la phase I et la phase II. On complète cette loi par une phase d'adoucissement qui s'applique pour les grandes valeurs de η^p .

La loi d'érouissage retenue est définie par :

$$\begin{cases} \tau_C = \tau_0 + \mu \zeta (1 - \exp((-x \eta^p))) & \text{si } \eta^p < \eta_{II} \\ \tau_C = \tau_{lim} \frac{\eta^p - \eta_{\mathcal{R}}}{\eta_{II} - \eta_{\mathcal{R}}} & \text{sinon} \end{cases} \quad (6.9)$$

Où :

$$\tau_{lim} = \tau_0 + \mu \zeta (1 - \exp((-x \eta_{II}))) \approx \tau_0 + \mu \zeta \quad (6.10)$$

L'énergie infinitésimale dissipée par unité de volume pour un glissement plastique infinitésimal $d\gamma$ est corrigée avec la nouvelle loi (6.9), et ainsi (3.29) est réécrite :

$$\mathcal{D} [\Delta\gamma_1^*, \dots, \Delta\gamma_N^*] = \sum_{k=1}^N \int_{\Omega_k} \left[\int_0^{|\Delta\gamma_k^*|} \tau_C(k) d\gamma \right] d \quad (6.11)$$

En outre, comme on a supposé que le glissement plastique est uniforme dans chaque grain, et en ajoutant (3.28) et (6.5) à (6.11) on obtient :

$$\mathcal{D} [\Delta\gamma_1^*, \dots, \Delta\gamma_N^*] = \sum_{k=1}^N |\Omega_k| \left[(\tau_0(k) + \mu \zeta) |\Delta\gamma_k^*| - \frac{\mu \zeta}{x} \exp(-x \eta_k^{p,j-1}) (1 - \exp(-x |\Delta\gamma_k^*|)) \right]. \quad (6.12)$$

Sa dérivée s'écrit pour $\Delta\gamma_k^* \neq 0$:

$$\frac{\partial \mathcal{D}}{\partial \Delta\gamma_k^*} = |\Omega_k| [(\tau_0(k) + \mu\zeta) - \mu\zeta \exp(-x(|\Delta\gamma_k^*| + \eta_k^{p,j-1}))] \frac{\Delta\gamma_k^*}{|\Delta\gamma_k^*|}. \quad (6.13)$$

6.2.1 Minimisation de l'énergie incrémentale

La condition de stationnarité du nouveau problème de minimisation nécessite de recalculer la dérivée de l'énergie dissipée par rapport aux glissements plastiques et de reprendre la dérivée de l'énergie potentielle en (4.18). Les conditions de stationnarité deviennent :

$$-\bar{\beta}_k^j + \sum_{l=1}^N \alpha_{kl} (\Delta\gamma_l^p + \gamma_l^{p,j-1}) + [\tau_0(k) + \mu\zeta - \mu\zeta \exp(-x(|\Delta\gamma_k^p| + \eta_k^{p,j-1}))] \frac{\Delta\gamma_k^p}{|\Delta\gamma_k^p|} = 0. \quad (6.14)$$

En utilisant l'équation (6.14), on obtient :

$$\Delta\gamma_k^p = \begin{cases} \Delta\gamma_k^+ & \text{si } \Delta\gamma_k^+ > 0, \\ \Delta\gamma_k^- & \text{si } \Delta\gamma_k^- < 0, \\ 0 & \text{si } \Delta\gamma_k^+ \leq 0 \text{ et } \Delta\gamma_k^- \geq 0, \end{cases} \quad (6.15)$$

Avec :

$$\begin{aligned} \Delta\gamma_k^+ &= -\gamma_k^{p,j-1} + \frac{\bar{\beta}_k^j - (\tau_0(k) + \mu\zeta)}{\mu\alpha_{kk}} - \kappa_k \\ &+ \frac{1}{x} \mathcal{W} \left[\frac{\zeta x}{\alpha_{kk}} \exp \left(-x \left(\frac{\bar{\beta}_k^j - (\tau_0(k) + \mu\zeta)}{\mu\alpha_{kk}} + (\eta_k^{p,j-1} - \gamma_k^{p,j-1}) - \kappa_k \right) \right) \right] \\ \Delta\gamma_k^- &= -\gamma_k^{p,j-1} + \frac{\bar{\beta}_k^j + (\tau_0(k) + \mu\zeta)}{\mu\alpha_{kk}} - \kappa_k \\ &- \frac{1}{x} \mathcal{W} \left[\frac{\zeta x}{\alpha_{kk}} \exp \left(x \left(\frac{\bar{\beta}_k^j + (\tau_0(k) + \mu\zeta)}{\mu\alpha_{kk}} - (\eta_k^{p,j-1} + \gamma_k^{p,j-1}) - \kappa_k \right) \right) \right] \end{aligned} \quad (6.16)$$

Où l'on a posé :

$$\kappa_k = \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^N \frac{\alpha_{kl}}{\alpha_{kk}} (\Delta\gamma_l^p + \gamma_l^{p,j-1}), \quad (6.17)$$

et où \mathcal{W} est la fonction de Lambert définie comme étant la réciproque de la fonction $f(w) = we^w$, i.e. qui vérifie

$$\forall (z, w) \in \mathbb{C}^2 \quad z = we^w \Leftrightarrow w = \mathcal{W}(z). \quad (6.18)$$

Notons que les expressions (6.16) ne sont pas explicites car les glissements plastiques des autres grains (autre que k) figurent dans l'expression du coefficient κ_k . À l'image de ce qui a été présenté dans les chapitres précédents, on développe dans la suite de ce chapitre des solutions explicites en considérant d'abord le cas sans interaction et ensuite celui avec interactions faibles.

6.2.2 Cas sans interaction

Considérons tout d'abord le problème entièrement découplé, où les grains sont indépendants, ce qui correspond à $\alpha_{kl} = 0$ si $k \neq l$, conduisant à $\kappa_k = 0$ pour tout k tel que $1 \leq k \leq N$. Dans ce cas, l'équation (6.16) peut être directement utilisée car pour chaque grain d'indice k la solution ne dépend pas de la solution des autres grains. Cette solution sans interaction est notée $\Delta^0 \gamma_k^p$, et elle est donnée par :

$$\Delta^0 \gamma^p = \begin{cases} \Delta^0 \gamma_k^+ & \text{si } \Delta^0 \gamma_k^+ > 0, \\ \Delta^0 \gamma_k^- & \text{si } \Delta^0 \gamma_k^- < 0, \\ 0 & \text{si } \Delta^0 \gamma_k^+ \leq 0 \text{ et } \Delta^0 \gamma_k^- \geq 0, \end{cases} \quad (6.19)$$

Avec :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta^0 \gamma_k^+ = -\gamma_k^{p,j-1} + \frac{\bar{\beta}_k^j - (\tau_0(k) + \mu\zeta)}{\alpha_{kk}} \\ \quad + \frac{1}{x} \mathcal{W} \left[\frac{\zeta x}{\alpha_{kk}} \exp \left(-x \left(\frac{\bar{\beta}_k^j - (\tau_0(k) + \mu\zeta)}{\alpha_{kk}} + (\eta_k^{p,j-1} - \gamma_k^{p,j-1}) \right) \right) \right], \\ \Delta^0 \gamma_k^- = -\gamma_k^{p,j-1} + \frac{\bar{\beta}_k^j + (\tau_0(k) + \mu\zeta)}{\alpha_{kk}} \\ \quad - \frac{1}{x} \mathcal{W} \left[\frac{\zeta x}{\alpha_{kk}} \exp \left(x \left(\frac{\bar{\beta}_k^j + (\tau_0(k) + \mu\zeta)}{\alpha_{kk}} - (\eta_k^{p,j-1} + \gamma_k^{p,j-1}) \right) \right) \right]. \end{array} \right. \quad (6.20)$$

Formules stabilisées pour la solution découplée

L'incrément de glissement plastique dans le cas d'une absence d'interaction pour la loi d'écroissage à 3 phases est écrit pour $j \rightarrow \infty$ et pour $x = 1$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta^0 \gamma_k^+ = 0 = -\gamma_k^\infty + \frac{\sigma_{nt}^m + \sigma_{nt}^a - (\tau_0(k) + \mu\zeta)}{\alpha_{kk}} \\ \quad + \mathcal{W} \left[\frac{\zeta}{\alpha_{kk}} \exp \left(- \left(\frac{\sigma_{nt}^m + \sigma_{nt}^a - (\tau_0(k) + \mu\zeta)}{\alpha_{kk}} + (\eta_k^\infty - \gamma_k^\infty) \right) \right) \right] \\ \Delta^0 \gamma_k^- = 0 = -\gamma_k^\infty - \Delta^0 \gamma_k^+ + \frac{\sigma_{nt}^m - \sigma_{nt}^a + (\tau_0(k) + \mu\zeta)}{\alpha_{kk}} \\ \quad - \mathcal{W} \left[\frac{\zeta}{\alpha_{kk}} \exp \left(\left(\frac{\sigma_{nt}^m - \sigma_{nt}^a + (\tau_0(k) + \mu\zeta)}{\alpha_{kk}} - (\eta_k^\infty + \gamma_k^\infty + 2\Delta^0 \gamma_k^+) \right) \right) \right] \end{array} \right.$$

En utilisant la définition de la fonction de Lambert, le système précédent est simplifié et peut être réécrit comme suit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\exp((\eta_k^\infty))} = \frac{\alpha_{kk}}{\zeta} \left(\gamma_k^\infty - \frac{\sigma_{nt}^m + \sigma_{nt}^a - (\tau_0(k) + \mu\zeta)}{\alpha_{kk}} \right) \\ \frac{1}{\exp((\eta_k^\infty))} = \frac{\alpha_{kk}}{\zeta} \left(-\gamma_k^\infty + \frac{\sigma_{nt}^m - \sigma_{nt}^a + (\tau_0(k) + \mu\zeta)}{\alpha_{kk}} \right) \end{array} \right.$$

Le glissement plastique et le glissement plastique cumulé dans l'état stabilisé pour la loi d'écroissage à 3 phases dans le cas d'absence d'interaction :

$$\left\{ \begin{array}{l} \eta_k^\infty = -\ln \left(\frac{\tau_0(k) + \mu\zeta - \sigma_{nt}^a}{\zeta} \right) \\ \gamma_k^\infty = \frac{\sigma_{nt}^m}{\alpha_{kk}} \end{array} \right. \quad (6.21)$$

L'application de ces formules est conditionnée par certaines conditions. La première étant liée au signe de $\eta_k^p > 0$ et la deuxième aux paramètres de chargement comme pour (5.11). Nous avons alors les conditions suivantes :

$$\frac{|\sigma_{nt}^m|}{\alpha_k} \leq \frac{\sigma_{nt}^a}{\xi}, \quad (6.22)$$

Pour vérifier la validité des formules, les expressions stabilisées du glissement plastique et du glissement cumulé ont été comparées encore une fois au modèle mésoscopique appliqué pour un cristal à trois phases.

6.2.3 Cas des interactions faibles

Considérons maintenant les hypothèses d'interactions faibles introduites dans la section 4.2.2.2 (c'est-à-dire $\alpha_{kl}/\alpha_{kk} \ll 1$, ce qui conduit à $\kappa_k \ll 1$). Ces hypothèses

nous permettent de linéariser (6.16) à l'aide d'un développement de Taylor à l'ordre 1, qui s'écrit pour tout k tel que $1 \leq k \leq N$:

$$\Delta\gamma_k^\pm \approx \Delta^0\gamma_k^\pm + a_k \kappa_k, \quad (6.23)$$

Où on a posé :

$$a_k = \begin{cases} \frac{1}{1 + \mathcal{W} \left[\frac{\zeta x}{\alpha_{kk}} \exp \left(-x \left(\frac{\bar{\beta}_k^j - (\tau_0(k) + \mu\zeta)}{\alpha_{kk}} + (\eta_k^{p,j-1} - \gamma_k^{p,j-1}) \right) \right) \right]} & \text{si } \Delta^0\gamma_k^+ > 0, \\ \frac{1}{1 + \mathcal{W} \left[\frac{\zeta x}{\alpha_{kk}} \exp \left(x \left(\frac{\bar{\beta}_k^j + (\tau_0(k) + \mu\zeta)}{\alpha_{kk}} - (\eta_k^{p,j-1} + \gamma_k^{p,j-1}) \right) \right) \right]} & \text{si } \Delta^0\gamma_k^- < 0. \end{cases} \quad (6.24)$$

Par conséquent, le système à couplage linéaire s'écrit sous la forme matricielle suivante :

$$\begin{pmatrix} 1 & -a_1 \frac{\alpha_{12}}{\alpha_{11}} & \cdots & -a_1 \frac{\alpha_{1N}}{\alpha_{11}} \\ -a_2 \frac{\alpha_{21}}{\alpha_{22}} & 1 & \cdots & -a_2 \frac{\alpha_{2N}}{\alpha_{22}} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ -a_N \frac{\alpha_{N1}}{\alpha_{NN}} & \cdots & -a_N \frac{\alpha_{NN-1}}{\alpha_{NN}} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta\gamma_1^p \\ \vdots \\ \Delta\gamma_N^p \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} \Delta^0\gamma_1^p \\ \vdots \\ \Delta^0\gamma_N^p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a_1 \sum_{l=2}^N \frac{\alpha_{1l}}{\alpha_{11}} \gamma_l^{p,j-1} \\ \vdots \\ a_N \sum_{l=1}^{N-1} \frac{\alpha_{Nl}}{\alpha_{NN}} \gamma_l^{p,j-1} \end{pmatrix}.$$

Puis, en utilisant l'hypothèse $\alpha_{kl}/\alpha_{kk} \ll 1$ pour $k \neq l$, on obtient :

$$\begin{pmatrix} \Delta\gamma_1^p \\ \vdots \\ \Delta\gamma_N^p \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 & a_1 \frac{\alpha_{12}}{\alpha_{11}} & \cdots & a_1 \frac{\alpha_{1N}}{\alpha_{11}} \\ a_2 \frac{\alpha_{21}}{\alpha_{22}} & 1 & \cdots & a_2 \frac{\alpha_{2N}}{\alpha_{22}} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_N \frac{\alpha_{N1}}{\alpha_{NN}} & \cdots & a_N \frac{\alpha_{NN-1}}{\alpha_{NN}} & 1 \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} \Delta^0\gamma_1^p \\ \vdots \\ \Delta^0\gamma_N^p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a_1 \sum_{l=2}^N \frac{\alpha_{1l}}{\alpha_{11}} \gamma_l^{p,j-1} \\ \vdots \\ a_N \sum_{l=1}^{N-1} \frac{\alpha_{Nl}}{\alpha_{NN}} \gamma_l^{p,j-1} \end{pmatrix} \right]$$

Les termes d'interaction dans ce nouveau système de (6.25) sont toujours couplés, ce qui signifie que l'effet de tous les grains sur un grain particulier est pris en compte et réciproquement. Cependant, ces termes d'interaction α_{kl} sont écrits en fonction du tenseur d'Eshelby à l'intérieur de l'inclusion \mathbf{S}_{kk} (lorsque $k = l$) et les tenseurs d'Eshelby extérieurs $\mathbf{S}_{kl}(x)$ sinon. Ces derniers diminuent rapidement lorsque la distance entre les grains k et l augmente. Par conséquent, et comme dans le chapitre 4, nous supposons que $\alpha_{kl} \approx 0$ lorsque la distance entre les grains k et l est supérieure à la distance critique DC . En outre, un seul grain (le grain critique) subit la grande partie du glissement plastique et ses grains voisins contribuent au glissement plastique avec des valeurs d'un ordre de grandeur inférieur. Si le k -ième grain est supposé être un grain critique, cela impose que $\bar{\beta}_k^j - \pm(\tau_k^0 + \mu\zeta) \gg \bar{\tau}_l - \pm(\tau_l^0 + \mu\zeta)$ pour n'importe quel l parmi les voisins, et alors $a_l \ll a_k$ et $(\Delta^0\gamma_l^p + \gamma_l^{p,j-1}) \ll (\Delta^0\gamma_k^p + \gamma_k^{p,j-1})$ pour $k \neq l$. D'où :

$$\begin{cases} \Delta\gamma_k^p = \Delta^0\gamma_k^p + a_k \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^N \frac{\alpha_{kl}}{\alpha_{kk}} (\Delta^0\gamma_l^p + \gamma_l^{p,j-1}), \\ \Delta\gamma_l^p = \Delta^0\gamma_l^p + a_l \frac{\alpha_{lk}}{\alpha_{ll}} (\Delta^0\gamma_k^p + \gamma_k^{p,j-1}). \end{cases} \quad (6.25)$$

À partir de (6.25), la déformation plastique cumulée $\eta_k^{p,j}$ peut être facilement calculée pour tous les grains.

6.2.4 Critère de fatigue et de rupture

Maintenant que l'évolution élasto-plastique du grain critique et donc du polycristal est déterminée et que le critère d'endurance infinie est établi dans la section 5.3.1, on introduit dans cette section nos critères de rupture en fatigue pour déterminer le nombre de cycles à la rupture dans le cas d'endurance finie.

Loi de Basquin

La loi de Basquin [20] établit une relation inverse entre la durée de vie en fatigue d'un matériau et l'amplitude de contrainte qui lui est appliquée, on reprend l'expression telle qu'elle est présentée dans [122] :

$$N_f = \frac{A}{\sigma_{eq}^{-B}}, \quad (6.26)$$

où A et B sont deux constantes du matériau. Cette loi relie ainsi le nombre de cycle à la rupture à une contrainte équivalente choisie dans ce qui suit comme étant la contrainte équivalente du critère de fatigue mésoscopique dans (5.21) :

$$\sigma_{eq} = \sigma_{meso} = \max\{a\sigma_{nn}^m \pm (\sigma_{nt}^a + a\sigma_{nn}^a) - a\frac{\alpha''}{\alpha'}\sigma_{nt}^m\} \quad (6.27)$$

La contrainte équivalente du critère mésoscopique dépend du glissement plastique stabilisé, elle ne décrit pas correctement les cas où le grain ne s'adapte pas (i.e. les grains sont sollicités pour des niveaux de chargement qui s'approchent de la zone de fatigue oligocyclique).

Loi de Manson-Coffin

Dans ces cas d'endurance limitée en accommodation, ceci nous pousse à choisir une loi de rupture différente qui prend en compte l'amplitude de la déformation plastique dans le cycle stabilisé notée $\Delta\epsilon_{amp}$ grâce à une loi de Manson-Coffin :

$$N_f = \frac{A'\sqrt{\Delta\epsilon_{amp}}}{2B'}, \quad (6.28)$$

où A' et B' sont des coefficients du matériau, à fixer.

Rupture phase III

Par ailleurs, si on atteint une limite élastique nulle dans un grain du fait de l'adoucissement (Phase III de la courbe d'érouissage) le nombre de cycles ayant été nécessaires pour y parvenir est pris comme nombre de cycles à rupture N_f .

6.3 Résultats et discussion

6.3.1 Validation des formules stabilisées

Afin de valider les expressions simplifiées dans (6.21), On adopte la même approche qu'en 5.2.2 en considérant un grain en état d'adaptation et un chargement vérifiant le critère (6.22).

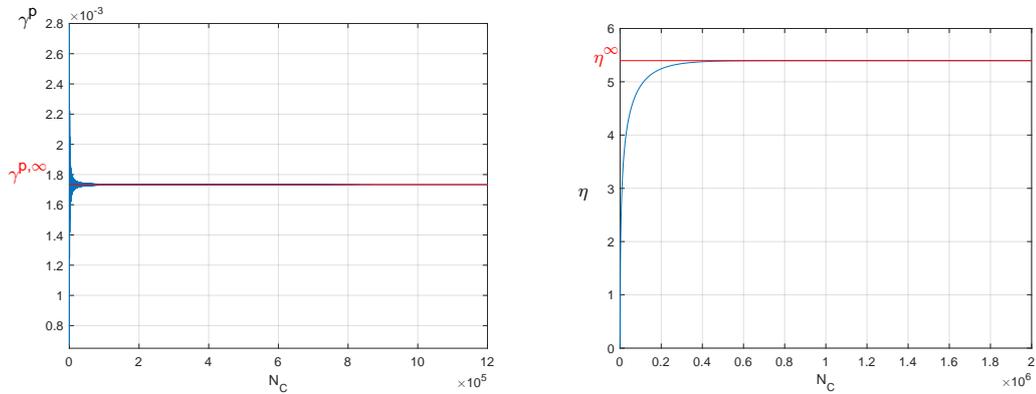
Les paramètres du matériau et du chargement sont résumés dans ce tableau :

E (GPa)	ν	σ_{amp} (MPa)	σ_{moy} (MPa)	ζ (MPa ⁻¹)	τ_c^0 (MPa)
210	0.3	101	50	$5 \cdot 10^{-2}$	90

TABLE 6.1 – Paramètres du matériau et du chargement macroscopique

Le comportement du grain est illustré en traçant le glissement plastique de ce dernier ainsi que son glissement cumulé en fonction du nombre des cycles du chargement N_C .

Les valeurs asymptotiques sont données par les lignes rouges :



(a) Glissement plastique en fonction du nombre de cycles

(b) Glissement plastique cumulé en fonction du nombre de cycles

FIGURE 6.2 – Validation par modèle mésoscopique

La différence relative reste inférieure à 1% et l'approche directe pour estimer l'état asymptotique est donc validée dans le cas d'interaction faible aux cristaux à trois phases.

6.3.2 Comparaison à la loi d'érouissage linéaire

La loi d'érouissage non-linéaire que nous avons proposée permet de mieux décrire la réalité du comportement des grains dans les polycristaux et de prendre en compte

les effets complexes des trois réponses possibles d'un grain (adaptation, accommodation et rochet). Ce point est illustré à la figure 6.3 par une comparaison des boucles d'hystérésis entre les deux lois d'érouissage étudiées (linéaire dans (3.27) et non-linéaire dans (6.5)). La loi linéaire ne peut donner qu'un comportement en adaptation, i.e. les grains présentent toujours un comportement élastique après un certain nombre de cycles (cf. figure 6.3.a). En revanche, la loi d'érouissage non linéaire parvient à capturer les autres comportements cycliques possibles, notamment l'accommodation, comme illustré à la figure 6.3.b où la réponse du grain se stabilise sur un cycle fermé. Bien que cette loi non-linéaire complexifie davantage notre modèle, elle améliore la représentativité des résultats de calculs.

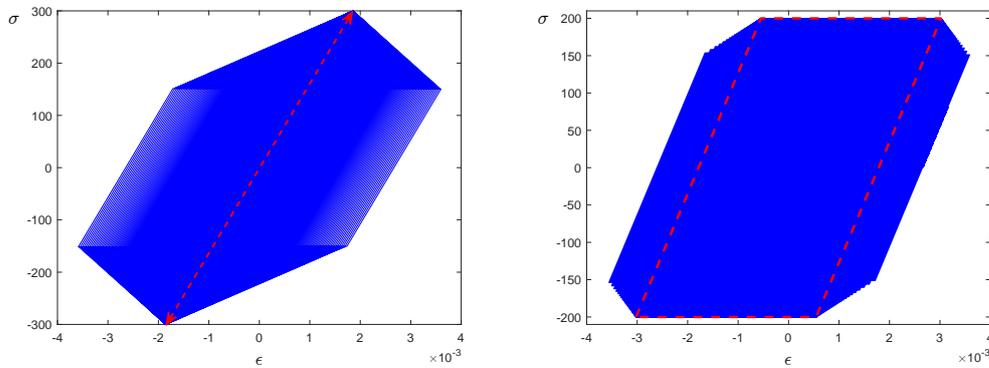


FIGURE 6.3 – Boucles d'hystérésis pour les deux lois d'érouissage : (a) Linéaire, (b) non-linéaire

Pour différents chargements macroscopiques en cisaillement pur $\bar{\sigma}(t) = f(t)(\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_2 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_1)$ représentés à la figure 6.4a on obtient à la figure 6.4b, pour la loi d'érouissage à trois phases, tous les types de régime de fatigue (élastique, adaptation, accommodation et rochet).

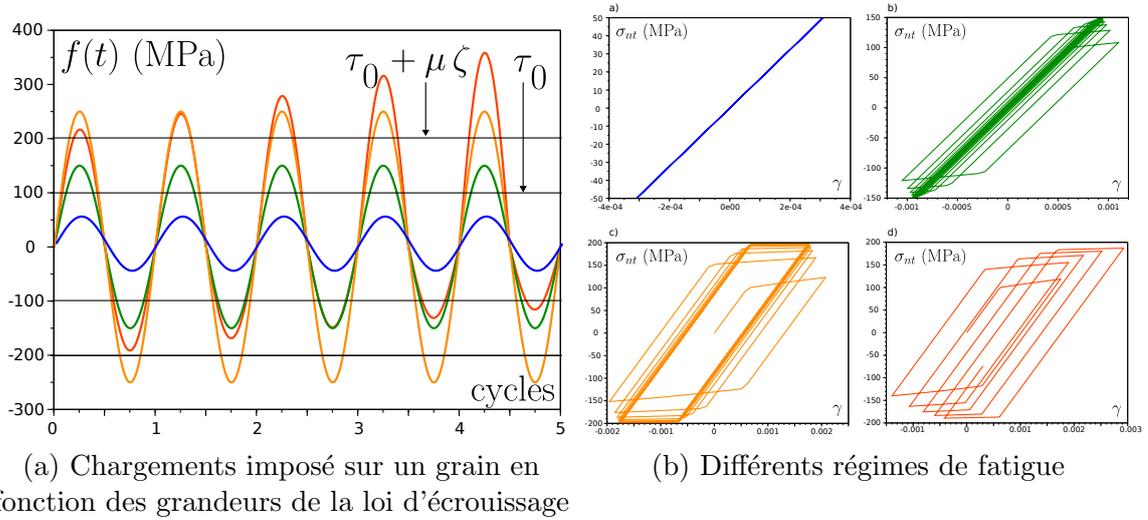


FIGURE 6.4 – Régimes de fatigue obtenus pour un grain avec écrouissage à trois phases

6.3.3 Analyse de sensibilité

Dans cette section, nous identifions les paramètres qui ont une influence importante sur le glissement plastique γ^p et le glissement plastique cumulé η^p d'un grain donné, et par conséquent sur la durée de vie de ce dernier. On observe dans le résultat (6.16) que les paramètres microstructuraux susceptibles d'influencer la durée de vie sont : l'orientation cristalline (qui joue un rôle à travers $\bar{\beta}_k^j$), la forme de l'ellipse décrivant le grain (qui apparaît dans l'expression du coefficient α_{kk}), et la taille du grain (à travers la relation de Hall-Petch (6.8)). Avant d'aborder la mise en oeuvre du modèle mésoscopique rapide sur un cas concret de structure, nous l'exploitons ici comme outil d'analyse de sensibilité. Le principe consiste à fixer l'ensemble des paramètres du polycristal, à l'exception d'un seul paramètre que l'on fait varier de manière progressive tout en enregistrant les réponses résultantes sous forme de courbes $S-N$. Cette analyse de sensibilité suit un double objectif. En premier lieu, elle vise à éliminer les paramètres dont l'impact sur les réponses en fatigue se révèle marginal, contribuant ainsi à rationaliser la modélisation. En second lieu, cette démarche permet de mettre en lumière la relation entre le paramètre d'intérêt et la probabilité de défaillance du matériau polycristallin.

Il convient alors d'utiliser la solution complètement découplée donnée par l'équation (6.20). Par ailleurs, notons que lorsque le grain s'adapte et atteint un état stationnaire, les formulations stabilisées énoncées dans l'équation (5.8) se révèlent applicables.

σ_{moy} (MPa)	$\zeta \times 10^{-4}$ (ad)	ξ_D (ad)	τ_{min} (MPa)	x (ad)	D_k (mm)	Φ (°)	b/a (ad)
0	4.4	0.05	59.2	1	0.3536	0	0.5

TABLE 6.2 – Paramètres du modèle et de géométrie.

α	β	$A \times 10^{14}$	B	A'	B'
0.7	30	7.5	3.6	0.47	-0.77

TABLE 6.3 – Paramètres des critères de fatigue et de rupture.

Cela permet ainsi d'établir un protocole facilitant l'obtention de N_f pour des paramètres de matériau connus (voir le tableau 6.2), tout en minimisant le temps de calcul requis. La première étape de ce protocole consiste dans le calcul des grandeurs initiales ($\tau_0(k)$ selon la loi de Hall-Petch (6.8), la maximum du plateau τ_{lim} qui est représenté figure 6.1, et la contrainte résolue de cisaillement sur le système de glissement σ_{nt} comme défini dans l'équation (5.16)).

En suivant les résultats obtenus figure 6.4, lorsque $\tau_0(k) > \sigma_{nt}$, le grain présente un comportement purement élastique.

Lorsque $\tau_0(k) < \sigma_{nt} < \tau_{lim}$ (**Phase I : Adaptation**), le critère de stabilisation est satisfait. Le grain s'adapte et ne peut résister au chargement que si le critère de fatigue polycyclique (d'endurance infinie) est vérifié. Dans le cas contraire, la loi de *Basquin* (6.26) est employée pour prédire le nombre de cycles à l'amorçage.

Si l'on accroît le chargement de manière à atteindre la valeur du plateau de la courbe d'écroutissage τ_{lim} (cf. figure 6.1) avec une tolérance spécifiée (**Phase II : Accommodation**), le glissement plastique du grain devient périodique après un certain nombre de cycles de chargement, avec une amplitude constante notée $\Delta\epsilon_{amp}$. Cette seconde phase correspond à la fatigue oligocyclique, et la durée de vie peut être caractérisée soit par la loi de *Manson-Coffin*, soit par les seuils η_{II} et $\eta_{\mathcal{R}}$ qui représentent respectivement le début et la fin de l'adoucissement dans la courbe d'écroutissage (cf. figure 6.1) et on note que $\eta_{\mathcal{R}}$ est atteint lorsque $\tau_C = 0$ indiquant que le grain est rompu.

La dernière phase (**Phase III : Rochet**), associée à la fatigue à très faible nombre de cycles, est déclenchée lorsque la contrainte projetée dépasse τ_{lim} avec la tolérance spécifiée. Dans ce contexte, N_f est simplement le nombre de cycles au bout desquels η^p atteint la valeur critique $\eta_{\mathcal{R}}$. L'ensemble de ce protocole est synthétisé dans le diagramme logique à la figure 6.5.

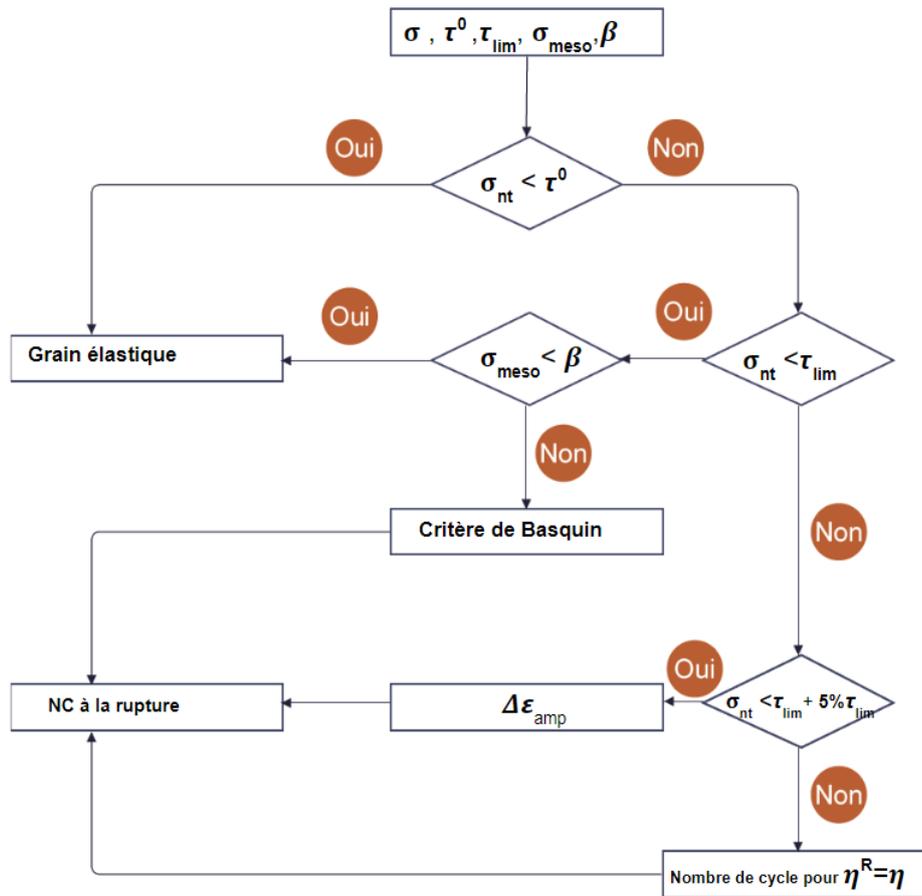


FIGURE 6.5 – Algorithme du calcul du nombre de cycle à la rupture.

6.3.3.1 Orientation cristallographique

Le point de départ réside dans l'évaluation du paramètre crucial dans la caractérisation d'un polycristal : l'orientation cristalline Θ . Les autres paramètres sont figés conformément aux valeurs spécifiées dans le tableau 6.2. Dans un polycristal en deux dimensions à structure cubique à faces centrées (CFC), l'angle Θ est contenu dans l'intervalle de 0° à 60° . Par conséquent, Θ varie à l'intérieur de cette plage angulaire. En s'appuyant sur l'algorithme décrit à la figure 6.5, la phase amorcée est identifiée, permettant ainsi de tracer l'évolution de N_f en fonction de l'orientation cristalline.

- **PHASE I :**

Dans le contexte d'une sollicitation en cisaillement pur caractérisée par une amplitude $f_{max} = -f_{min} = 79.21$ MPa, nous nous situons effectivement au sein de la phase d'adaptation du diagramme, où les formulations stabilisées sont applicables. Pour ce seuil de chargement, on trace la contrainte mésoscopique

notée $\sigma_{\text{meso}} = X$ et dont l'expression est rappelée par (6.27), ainsi que l'évolution de N_f en fonction de l'orientation cristalline.

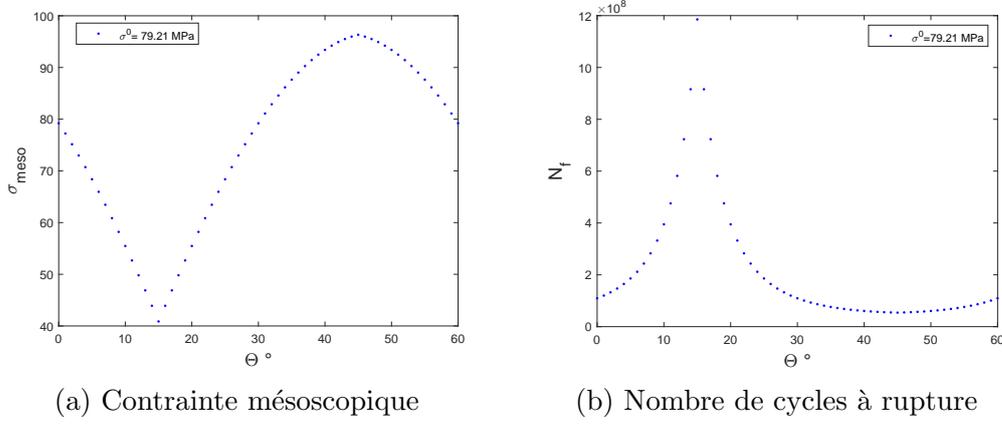


FIGURE 6.6 – σ_{meso} et N_f sont tracés en fonction de l'orientation cristalline Θ .

La contrainte mésoscopique qui apparaît dans le critère de fatigue démontre une périodicité avec une période de $\mathcal{T}_{\text{meso}} = 60^\circ$. Elle affiche une valeur minimale pour $\Theta = 15^\circ$ et un pic maximal pour $\Theta = 45^\circ$. Étant donné que le critère de fatigue n'est pas satisfait et que N_f varie inversement avec σ_{meso} , il en résulte que $\Theta = 45^\circ$ correspond à l'orientation la plus défavorable du cisaillement appliqué, tandis que l'orientation $\Theta = 15^\circ$ entraîne la plus faible déformation du grain et donc la plus grande durée de vie en phase d'amorçage.

PHASE II :

Pour un chargement macroscopique plus élevé ($f_{\text{max}} = 100.53$ MPa) et une tolérance de $\text{tol} = 1.5\%$ appliquée à τ_{lim} , la contrainte σ_{meso} croît naturellement avec l'augmentation du chargement. Pour ce niveau de chargement et pour des gammes spécifiques d'orientations, la condition $\tau_{\text{lim}} \leq \sigma^{nt} < \tau_{\text{lim}} + 1.5\% \tau_{\text{lim}}$ est satisfaite (autour de 0° , 30° et 60° comme on peut le voir figure 6.7). Par conséquent, le glissement plastique du grain atteint un cycle de stabilisation après un nombre fini de cycles, avec une amplitude $\Delta \epsilon_{\text{amp}}$. Le grain entre alors dans une phase d'accommodation, et son nombre de cycles avant rupture est déterminé par la loi de *Manson-Coffin*.

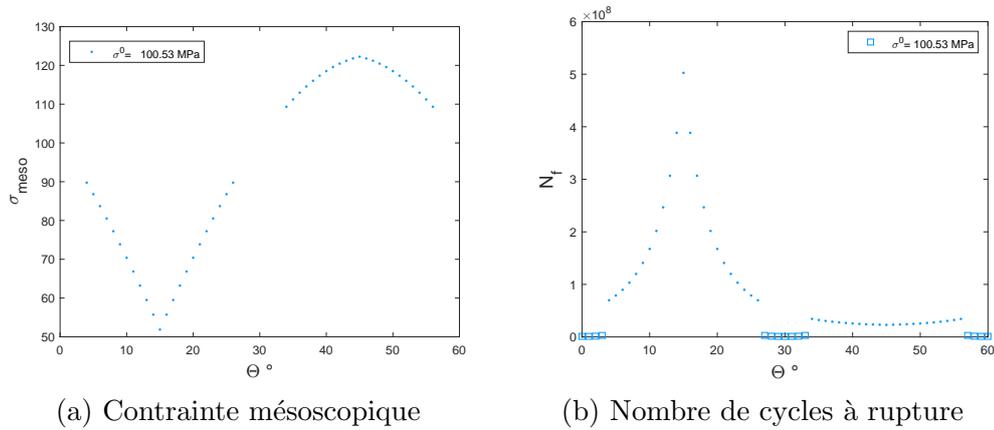


FIGURE 6.7 – σ_{meso} et N_f sont tracés en fonction de l'orientation cristalline Θ .

La durée de vie en fatigue pour un grain en phase d'adaptation est intrinsèquement supérieur à celui observé dans le contexte de l'accommodation, c'est pourquoi on observe à la figure 6.7b que certaines zones décrochent du reste de la courbe avec des valeurs plus faible de N_f .

- **PHASE III :**

Pour un chargement plus élevé $f_{max} = 121.84$ MPa, correspondant à des situations où les cas d'adaptation et d'accommodation deviennent moins fréquents, la phase de rochet est prédominante ce qui entraîne des durées de vie relativement courtes.

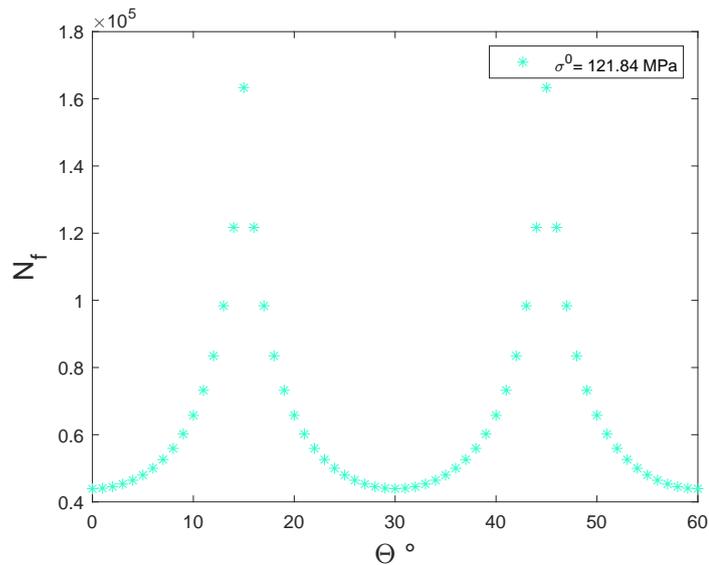


FIGURE 6.8 – N_f est tracé en fonction de l'orientation cristalline Θ .

En faisant varier l'intensité du chargement f_{max} dans la plage de 65 MPa à 200 MPa,

on constate une diminution de Nf , associée à l'émergence des phases d'accommodation et de rochet dans certains intervalles d'orientations où la contrainte mésoscopique est la plus élevée.

Pour quantifier la dispersion des nombres de cycles à rupture autour de la moyenne, des paramètres statistiques sont calculés, permettant également leur représentation graphique. Les indicateurs de dispersion employés dans la suite sont l'écart moyen absolu, l'écart médian absolu, la variance, l'écart-type et les quantiles. On reporte les définitions génériques de ces indicateurs en considérant des données notées v_i ($1 \leq i \leq N_{data}$), leur moyenne \bar{v} et leur médiane v' :

Écart moyen absolu	$E_{moy} = \frac{1}{N_{data}} \sum_{i=1}^{N_{data}} (v_i - \bar{v})$
Écart médian absolu	$E_{med} = \frac{1}{N_{data}} \sum_{i=1}^{N_{data}} (v_i - v')$
La variance	$V = \frac{1}{N_{data}} \sum_{i=1}^{N_{data}} (v_i - \bar{v})^2$
L'écart type	$\sigma_X = \sqrt{V}$
Quartile d'ordre x des données v	$Q(x) = \inf \{u \in \mathbb{R} P(v \leq u) = x\}$ $IQR = Q(0.75) - Q(0.25)$

TABLE 6.4 – Paramètres de dispersion.

La visualisation de la distribution de l'ensemble des données numériques, leur dispersion et symétrie sont illustrées à l'aide du diagramme à moustaches dont un exemple est tracé à la figure 6.9. Il se compose d'une boîte représentant la distance interquartile (IQR) des données, i.e. la plage entre le premier quartile ($Q_1 = Q(0.25)$) et le troisième quartile ($Q_3 = Q(0.75)$). Une ligne rouge à l'intérieur du rectangle représente la médiane (ou le deuxième quartile $Q_2 = Q(0.5)$). Les "moustaches" ou "whiskers" représentent l'ensemble des valeurs qui sont situées à l'extérieur de la boîte et qui s'étendent aux points de données les plus extrêmes qui ne sont pas considérés comme des valeurs aberrantes, et les valeurs aberrantes ou "outliers" sont représentées individuellement à l'aide du symbole de marquage "+" en rouge.

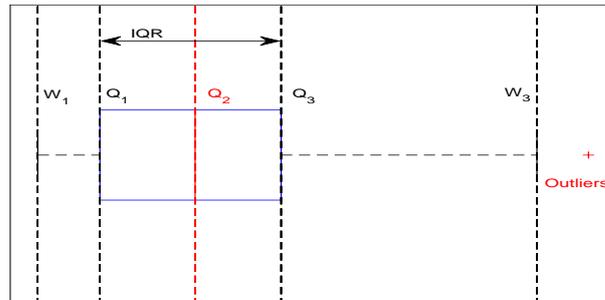
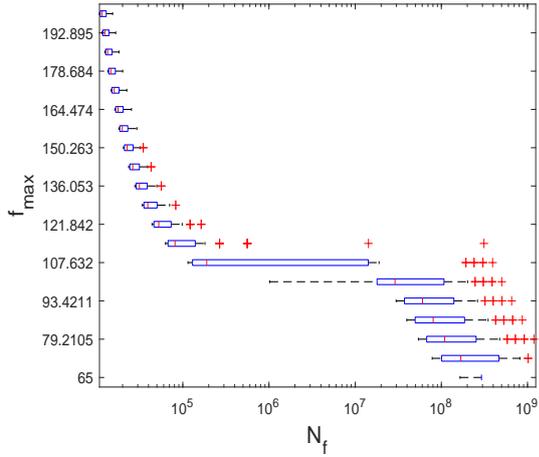
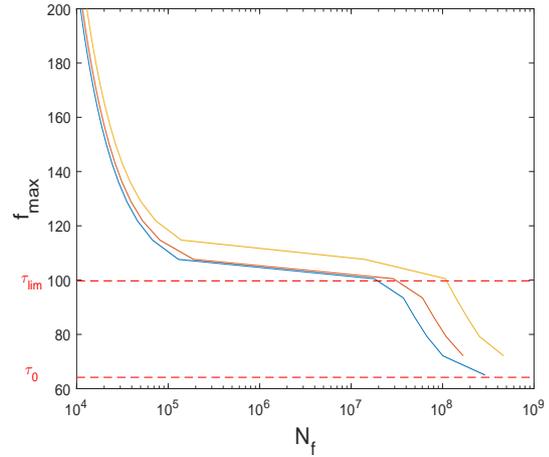
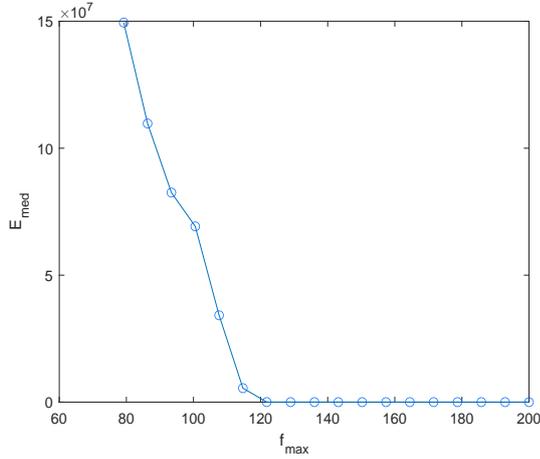
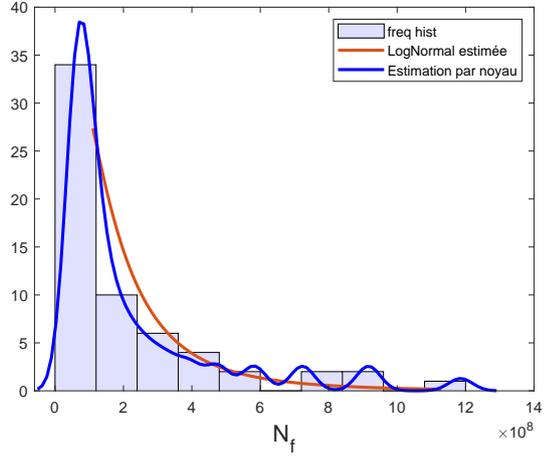


FIGURE 6.9 – Diagramme à moustaches.

En traçant le diagramme à moustaches pour des sévérités de chargement f_{max} à la figure 6.10a, on retrouve l'allure des courbes $S-N$ expérimentales avec en particulier des dispersions de plus en plus importantes pour les chargements faibles. Cette dispersion résulte directement de l'effet de l'orientation cristalline du grain (puisque tous les autres paramètres sont constants). Pour les zones à durée de vie intermédiaire (par exemple pour $f_{max} = 107.63$ MPa) la dispersion est la plus marquée puisqu'on retrouve un comportement combiné où on trouve des grains en adaptation à N_f de l'ordre de 10^7 et des grains en accommodation et rochet a faible niveau de durée de vie de l'ordre de 10^4 à 10^5 . La dispersion est minimale pour les fortes sollicitations, ceci est clairement visible si l'on se concentre sur l'évolution de la distance interquartile (IQR : taille de la boîte bleu) ou encore l'écart médian absolu qui évolue inversement par rapport au niveau de chargement (cf. figure 6.10c). Le diagramme des quartiles figure 6.10b souligne aussi cette dispersion.

(a) Diagramme à moustaches pour Θ variable.(b) Évolution de Q_1, Q_2, Q_3 pour des sévérités différentes

(c) Évolution de l'écart médian absolu en fonction du niveau de chargement.

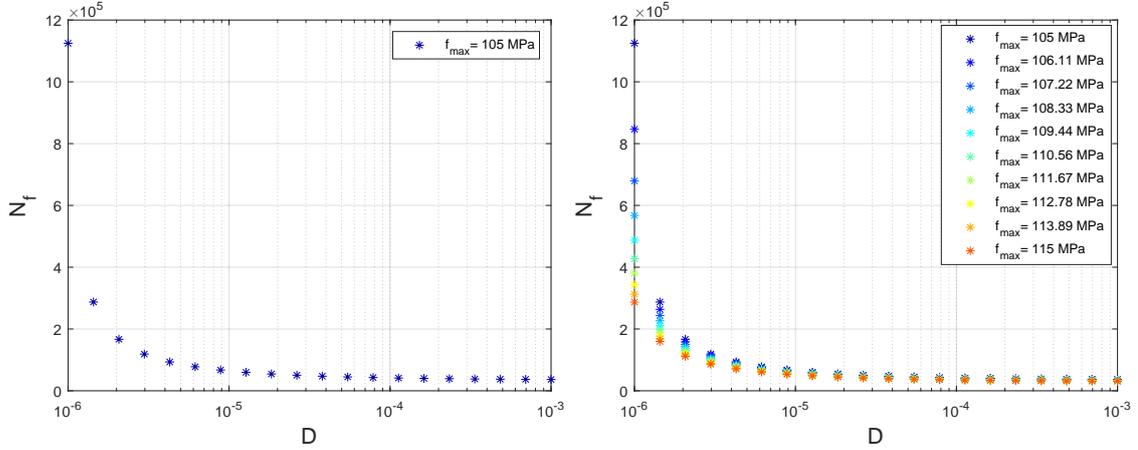
(d) Histogramme de N_f pour un niveau de chargement moyen.FIGURE 6.10 – Courbe $S-N$ et paramètres statistiques en fonction de l'orientation cristalline Θ .

L'influence de l'orientation cristalline du grain est soulignée dans cette partie où l'on montre que la dispersion due à l'orientation est importante et qu'elle s'accroît pour les faibles niveaux d'amplitude de chargement.

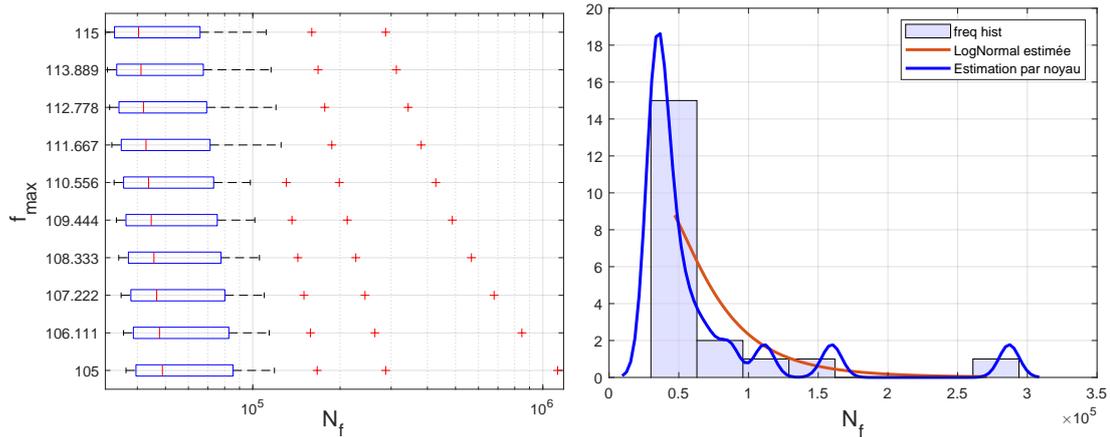
6.3.3.2 Tailles des grains

Le deuxième paramètre mésoscopique à étudier est la taille des grains D qui figure dans la loi de *Hall-Petch*. Le calcul de N_f dans les deux états d'adaptation et d'accommodation réalisé à travers les lois de rupture ((6.26) et (6.28)) ne dépend pas de τ_0 (et donc de la taille D). On se contente donc de n'étudier que la phase III dans le diagramme (rochet) puisque le calcul de N_f repose sur le calcul de η^p qui dépend de D . On considère le même polycristal que précédemment mais on fait varier la taille

globale de ce dernier pour jouer sur la taille des grains au lieu de l'orientation du grain critique, laquelle est fixée à $\Theta = 10^\circ$.



(a) Évolution de N_f en fonction de la taille des grains D . (b) Effet de f_{max} sur l'évolution de N_f .



(c) Diagramme à moustaches pour D variable. (d) Histogramme de N_f pour un niveau de chargement donné.

FIGURE 6.11 – Courbe $S-N$ et paramètres statistiques en fonction de la taille des grains

La courbe de la figure 6.11a montre l'évolution de N_f en fonction de la taille D . On observe une diminution de N_f à mesure que D augmente. Cette tendance est due au fait que τ_0 est inversement proportionnel à D dans (6.8). En effet, l'effet *Hall-Petch* stipule que la résistance à la déformation plastique augmente avec la diminution de la taille des grains. Cela est dû au fait que les joints de grains sont difficiles à franchir par les dislocations et que la densité de joints de grain est plus importante lorsque les grains sont plus petits. Ainsi les nombres de cycles à ruptures N_f sont plus élevés pour des tailles de grain plus petits.

La courbe $S-N$ est ainsi tracée à la figure 6.11c. La distance interquartile et la médiane évoluent légèrement en fonction du chargement. La principale évolution dans ce diagramme est celle des valeurs aberrantes qui augmentent en diminuant le chargement.

L'allure de l'histogramme est identique pour toutes les amplitudes. Comme le montre la figure 6.11d, on observe une asymétrie de la distribution qu'on peut approcher par une densité de distribution log-normal ($Log - \mathcal{N}$) avec une moyenne et un écart type dépendant du niveau de chargement.

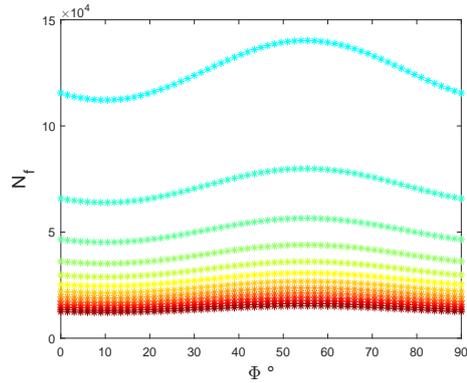
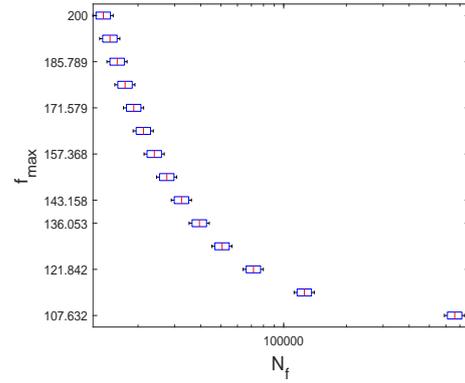
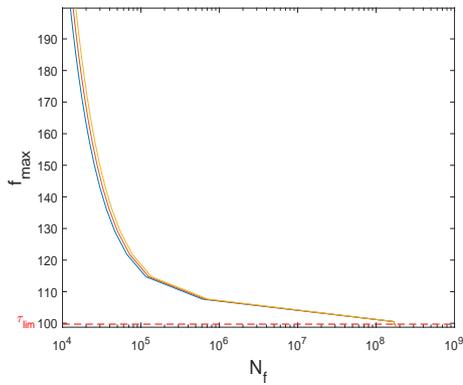
*La dispersion due à la variabilité de la taille des grains D n'affecte que les forts niveaux de chargement. Elle est **moins marquée comparée à celle de l'orientation cristalline**. On peut aussi observer que la réponse à la variabilité de la taille des grains suit une loi de distribution log-normal avec une moyenne et un écart type qui dépendent du chargement.*

6.3.3.3 Inclinaison de l'ellipse

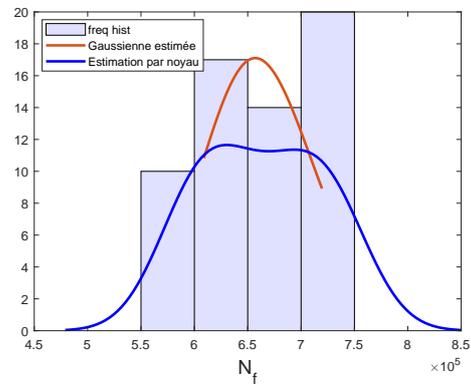
Nous étudions maintenant l'influence de l'inclinaison de l'ellipse décrivant le grain. On calcule la durée de vie N_f pour différentes valeurs d'inclinaison Φ et pour différents niveaux de chargement.

Les courbes présentées figure 6.12a montrent que la durée de vie est relativement peu sensible à l'inclinaison Φ . Cette remarque est soulignée dans les deux figures 6.12b et 6.12c où l'on constate que les boîtes sont bien étroites, avec des IQR constants, montrant ainsi que les valeurs des résultats sont assez similaires avec la majorité des valeurs dans une plage assez étroite autour de la médiane. L'histogramme sur la figure 6.12d présente une répartition quasi-homogène des résultats, ce qui se traduit par une fréquence similaire des différentes catégories, sans aucun pic notable ni valeur atypique.

L'impact de l'inclinaison de l'ellipse approximant le grain critique est peu marquée, avec une faible dispersion et une densité quasi uniforme. Ce faible impact est dû au fait que la circularité choisie dans notre étude est proche de 1. Concernant les grains très aplatis, on note que la durée de vie dépend de l'orientation des grains.

(a) Évolution de N_f en fonction de Φ .(b) Diagramme pour Φ variable.

(c) Évolution des quartiles.

(d) Histogramme pour un f_{max} donné.FIGURE 6.12 – Courbe $S-N$ et paramètres statistique en fonction de l'inclinaison des grains.

6.3.3.4 Circularité de l'ellipse

Dans ce paragraphe, on étudie l'influence de la circularité du grain critique, c'est-à-dire le rapport b/a , avec a et b le grand et le petit demi axes de l'ellipse décrivant le grain. Afin de saisir tout l'effet de ce paramètre, l'étude est effectuée pour deux orientations cristallines (30° et 45°) qui donnent les deux valeurs extrêmes dans le cas rochet dans la figure 6.8. On fait varier le rapport de b/a en gardant la surface du grain constante pour éliminer l'effet de la taille et ainsi prendre en compte la forme du grain uniquement. Le reste des paramètres demeure inchangé. Comme dans la section précédente, on calcule la durée de vie pour différentes amplitudes de chargement.

- Pour $\Theta = 30^\circ$:

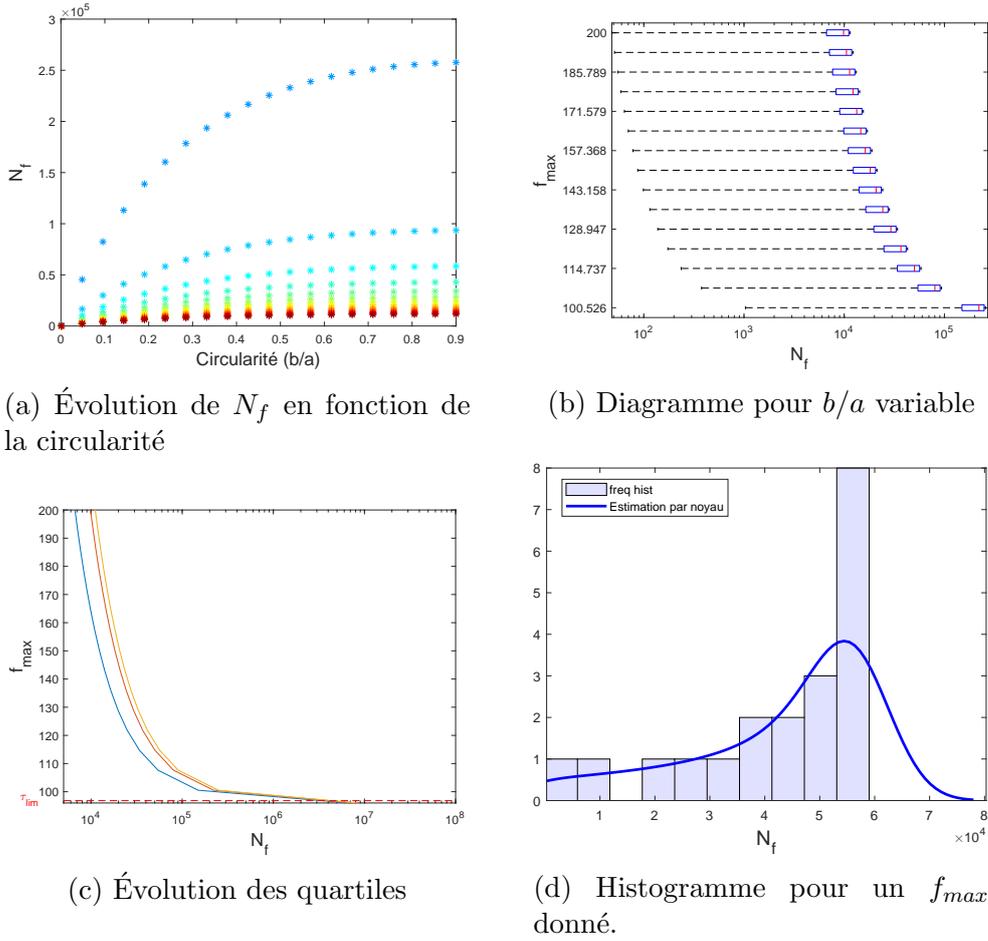


FIGURE 6.13 – Courbe $S-N$ et paramètres statistique en fonction de la circularité du grain critique pour une orientation cristalline de 30° .

Les résultats montrent que seul l'état rochet est actif et que N_f augmente exponentiellement en fonction de $\frac{b}{a}$. Pour cette orientation cristalline, on observe que plus le grain est circulaire plus il résiste au chargement appliqué. Une interprétation de ce résultat est que les grains circulaires ont une structure plus uniforme qui offre une meilleure résistance au chargement.

La dispersion sur la durée de vie varie très peu avec l'amplitude de chargement comme le montrent les deux figures 6.13b et 6.13c. L'histogramme figure 6.13d montre un exemple de distribution de N_f pour une amplitude de chargement donnée. On observe une distribution asymétrique avec une concentration des résultats à gauche de la médiane et des valeurs rares et éloignées de la médiane à droite. Les valeurs extrêmes situées à droite du graphe peuvent avoir un impact significatif sur les résultats de notre analyse statistique, il est donc important de prendre ce paramètre en considération.

- Pour $\Theta = 45^\circ$:

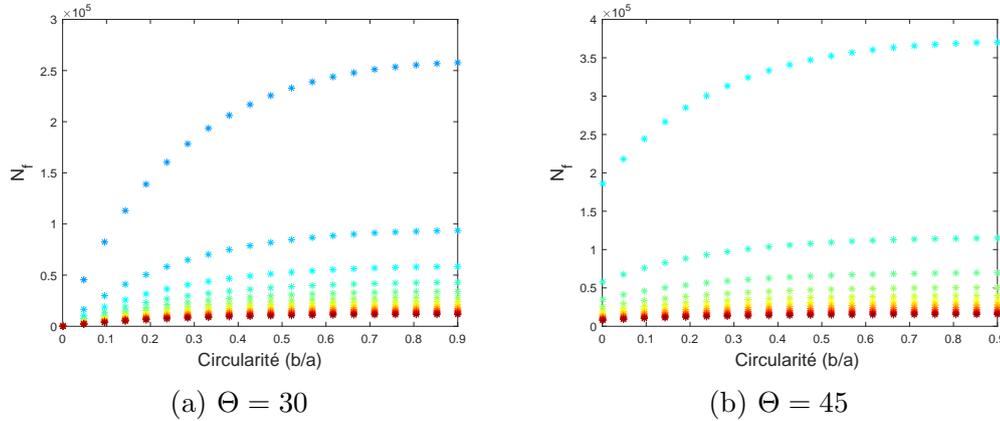


FIGURE 6.14 – Évolution du nombre de cycles à la rupture en fonction la circularité pour des niveaux de chargements différents.

Nous reprenons la même démarche pour une orientation cristalline de $\Theta = 45^\circ$. On remarque d'abord que pour les grains circulaires le seul effet qui gouverne le nombre de cycle à rupture est l'orientation cristalline. Pour les grains aplatis, si la direction de glissement est parallèle au grain (par exemple pour $\Theta = 30^\circ$ qui est équivalente à 0° selon la figure 6.8) on a une tenue en fatigue nulle comparée au même grain pour une orientation cristalline de 45° . Ces résultats sont en cohérence avec l'étude en loi d'écroissage linéaire effectuée à la section 5.3.2.

6.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons mis en place un modèle d'écroissage plus avancé qui permet de mieux rendre compte des comportements possibles du grain (adaptation, accommodation et rochet). Le modèle mésoscopique a été modifié en conséquence.

L'analyse de sensibilité a montré que l'orientation cristalline du grain critique est un facteur déterminant sur la durée de vie. Sa variabilité se traduit par une dispersion des courbes $S-N$, comme on peut l'observer expérimentalement. La taille des grains joue un rôle au travers de la loi de Hall-Petch, mais l'effet n'est significatif que pour la phase III. Pour des circularités moyennes, la durée de vie est peu sensible à l'inclinaison de l'ellipse décrivant le grain. Par contre, pour des grains aplatis, l'inclinaison a une influence forte sur la durée de vie et le système de glissement activé. Cette observation met en évidence l'importance de l'interaction

entre l'orientation cristalline et la géométrie des grains dans le comportement des polycristaux.

Chapitre 7

Application au cas du stent

Sommaire

7.1	Introduction	109
7.2	Présentation du cas d'étude : Stents métalliques	110
7.2.1	Types de stents	110
7.2.2	Fonctionnement et cycle de vie	111
7.3	Modélisation par éléments finis	112
7.3.1	Passage d'une étude 3D à 2D	114
7.3.2	Zones critiques étudiées	115
7.4	Résultats et discussion	117
7.4.1	Influence de l'orientation cristalline	117
7.4.2	Influence du nombre de grains	119
7.4.3	Influence entre grains voisins	120
7.5	Conclusion	123

7.1 Introduction

Dans ce chapitre d'application, nous choisissons une structure dont la durée de vie en fatigue revêt une importance cruciale et est étroitement liée à sa microstructure pour d'abord appliquer notre modèle mésoscopique et ensuite mettre en évidence son utilité pour une étude statistique. La structure choisie est celle des stents métalliques. Ce chapitre débute par une brève présentation des stents et de leur fonctionnement. Ensuite, nous procédons à une modélisation aux éléments finis sur *ABAQUS*, en concentrant l'étude sur deux zones critiques bien choisies. Ces deux zones critiques sont étudiées à l'aide du modèle mésoscopique mis en place dans les chapitres précédents pour notamment étudier l'influence sur la durée de vie de trois principaux facteurs microscopiques : l'orientation cristalline du grain critique, le nombre de grains dans le polycristal et l'influence entre grains voisins.

7.2 Présentation du cas d'étude : Stents métalliques

Les stents métalliques sont des dispositifs médicaux en forme de tubes minces à motifs répétés, et sont généralement fabriqués à partir de matériaux comme l'acier inoxydable, des alliages (le cobalt-chrome ou le platine-chrome) ou le Nitinol [123]. Ils sont employés pour traiter les problèmes de circulation sanguine, et sont insérés dans les vaisseaux sanguins rétrécis ou obstrués afin de maintenir leur ouverture et de garantir un flux sanguin adéquat vers les organes.

Au fil du temps, le tissu de l'artère se développe autour du stent, le fixant en place de manière permanente. Certains stents sont également revêtus de médicaments pour réduire le risque de réformation excessive de tissu à l'intérieur de l'artère.

Plusieurs incidents ont été signalés [86, 124, 125, 126] où ces stents se sont rompus bien avant leur durée de vie prévue. Étant donné l'importance critique de ces structures, leur durabilité est un sujet essentiel dans les études de fatigue, y compris dans la nôtre.

Les caractéristiques microstructurales des stents métalliques telles que la taille des grains, l'orientation cristallographique de ces derniers ou encore la présence des défauts ont un impact sur leur tenue en fatigue. Certaines microstructures particulières peuvent entraîner une réduction de la durabilité des stents. Il est donc essentiel de bien identifier les descriptifs des microstructures les plus défavorables par rapport aux sollicitations subies.

7.2.1 Types de stents

On distingue deux types de stents qui diffèrent par le matériau utilisé et le protocole d'insertion dans l'artère :

- Le stent expansible par ballon, en acier ou en chrome-cobalt, est appliqué à la paroi artérielle en gonflant le ballonnet du cathéter (Figure 7.1a). Ce processus dilate l'artère et place le stent en position pour maintenir l'ouverture.
- Le stent auto-expansible en Nitinol (Figure 7.1b), un alliage de nickel et de titane. Ce type de stent se déploie et s'adapte à l'artère, sans nécessiter de ballonnet pour l'expansion.

Ces deux types de stents ont chacun leurs propres avantages et applications, offrant aux médecins diverses options pour soigner les problèmes cardiaques spécifiques à chaque patient. Nous nous intéressons dans ce qui suit au deuxième type.

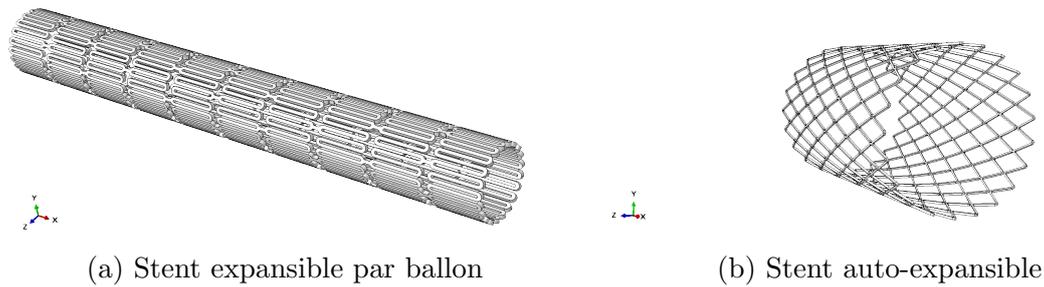


FIGURE 7.1 – Illustration des deux types de stents.

7.2.2 Fonctionnement et cycle de vie

Le stent métallique est inséré dans l'artère rétrécie lors d'une procédure médicale appelée angioplastie coronarienne ou dilatation. Au cours de cette procédure, le stent est inséré sous la forme d'un tube mince comprimé au dessous de son diamètre de fabrication (\mathcal{D}_0) dans l'artère cible. Une valeur caractéristique de \mathcal{D}_0 est égale à 8 mm [127], elle sera utilisée dans la suite. Une fois en place, le stent se dilate et fait pression sur les parois intérieures du vaisseau, élargissant ainsi l'espace interne pour améliorer le flux sanguin.

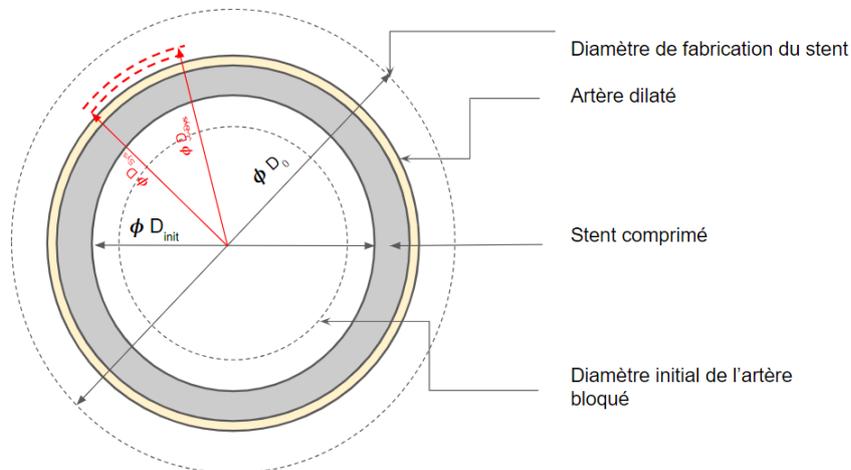


FIGURE 7.2 – Schéma d'installation du stent dans un vaisseau sanguin.

Une fois déployés, les stents sont sollicités de façon cyclique du fait du cycle cardiaque. Ce dernier s'accompagne en effet d'une variation de la pression sanguine qui se traduit par une variation du diamètre du stent entre deux valeurs notées \mathcal{D}_{Sys} (systole) et \mathcal{D}_{Dis} (diastole). Les valeurs caractéristiques des diamètres de fonctionnement

sont [127] :

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{\text{Dis}} &= 7.05 \text{ mm}, \\ \mathcal{D}_{\text{Sys}} &= 6.77 \text{ mm}. \end{aligned} \quad (7.1)$$

7.3 Modélisation par éléments finis

Une modélisation par EF a été mise en place afin de déduire les valeurs des contraintes requises par le modèle mésoscopique. Le stent considéré est constitué d'un motif répété, ce qui nous permet par symétrie de restreindre notre modélisation à un seul motif seulement.

La modélisation de notre structure est réalisée sur le logiciel *ABAQUS*. La géométrie est inspirée de [128] et les paramètres géométriques sont identiques à ceux de [127].

Le matériau considéré est du Nitinol, dont les modules élastiques sont $E_{\text{Nitinol}} = 40000 \text{ MPa}$ et $\nu_{\text{Nitinol}} = 0.33$.

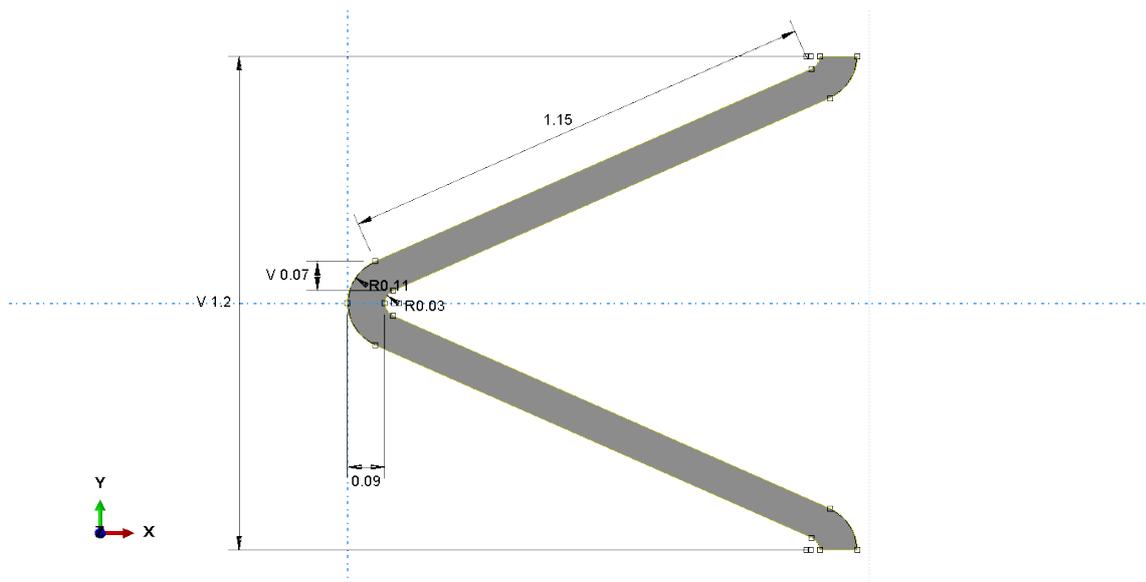
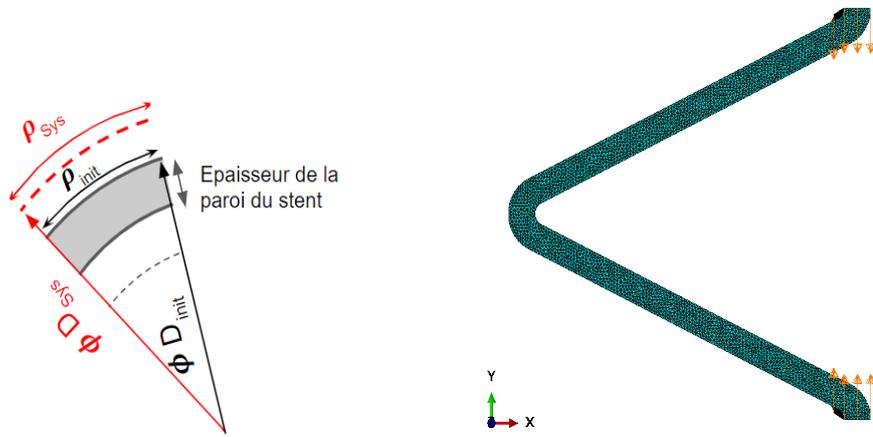


FIGURE 7.3 – Géométrie du motif du stent.

Dans cette étude, nous considérons que le stent est soumis uniquement aux sollicitations générées par les phases de **diastole** et de **systole** du coeur. Ces deux phases entraînent des variations successives du diamètre du stent, qui sont modélisées à l'échelle du motif en appliquant des déplacements (selon l'axe Y à la figure 7.3) aux deux extrémités comme indiqué à la figure 7.4b. En tenant compte du fait que 21 motifs composent la périphérie du stent, nous pouvons en effet retrouver la déformation appliquée sur un seul motif à partir de la variation du diamètre du stent.



(a) Schéma de fonctionnement pour la phase systole

(b) Maillage du motif et sollicitations appliquées

FIGURE 7.4 – Contraintes appliquées et simulées lors de la phase systole

Pour garantir des résultats précis et fiables, le choix adéquat du maillage est crucial. Dans cette étude, nous avons opté pour un maillage tétraédrique tridimensionnel illustré à la figure 7.5. En particulier, ce maillage a été raffiné dans le coude intérieur du stent où les gradients seront probablement les plus élevés.

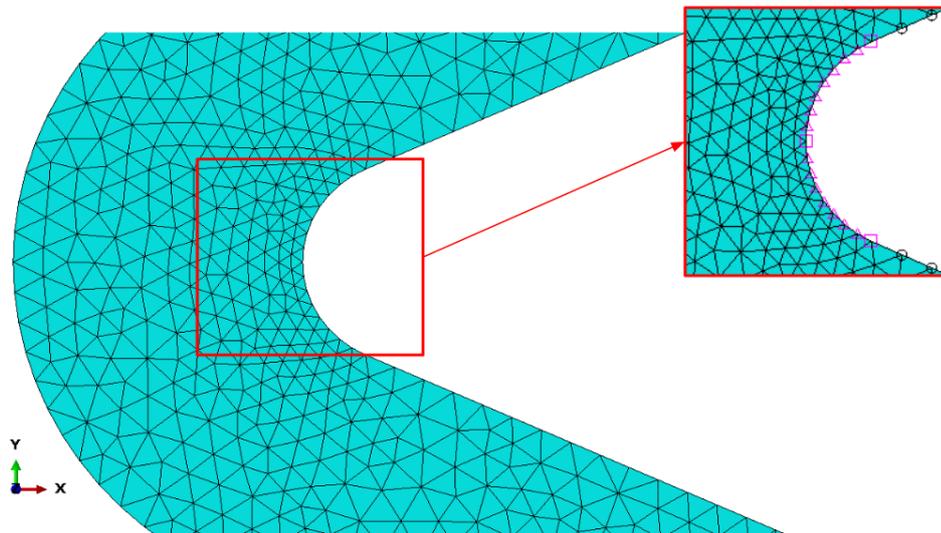


FIGURE 7.5 – Maillage tétraédrique et raffinement sur le coude du stent

7.3.1 Passage d'une étude 3D à 2D

La modélisation par EF a d'abord été menée en 3D. Les résultats (selon des perspectives différentes) sont montrés figures 7.6 et 7.7. Comme on l'avait anticipé, le calcul des contraintes dans le stent montre effectivement un gradient important sur la paroi intérieure du coude de la structure. De plus, la coupe suivant la vue XZ (cf. figure 7.6b) nous dévoile que les contraintes ne montrent quasi aucune variation en fonction de l'épaisseur de la structure (suivant l'axe Z), il est donc réaliste d'envisager une approche bidimensionnelle sans perdre d'information sur la direction transversale. On choisit d'adopter cette approche pour la suite.

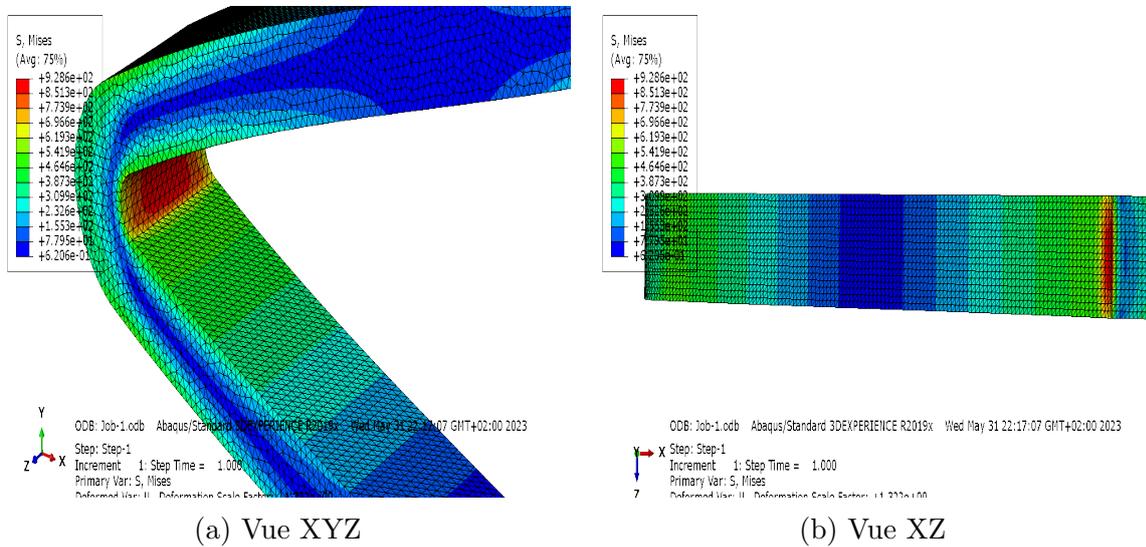


FIGURE 7.6 – Visualisation du champ de contrainte de Von-Mises en 3D.

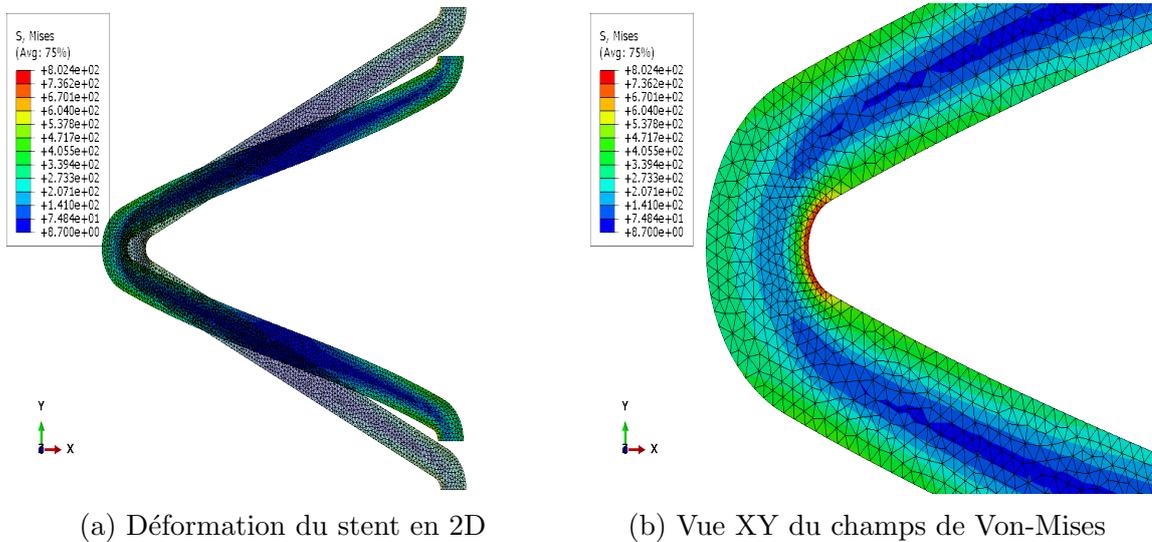


FIGURE 7.7 – Visualisation du champ de contrainte de Von-Mises en 2D.

7.3.2 Zones critiques étudiées

Deux zones critiques différentes ont été sélectionnées pour appliquer notre modèle mésoscopique. Ces deux zones, notées \mathcal{A} et \mathcal{B} , correspondent à 2 éléments particuliers du maillage éléments finis. La zone \mathcal{A} est située sur la partie intérieure du coude, elle est représentée figure 7.8, et correspond à un endroit où la contrainte de Von Mises est maximale. Notons que le gradient de contrainte est important dans cette région, ce qui nécessite d'utiliser des éléments relativement petits pour assurer que la contrainte varie peu sur chaque élément. La zone \mathcal{A} ayant une dimension caractéristique inférieure au dixième de l'épaisseur du stent ($e = 0.17$ mm), il convient de la considérer comme constituée d'un seul grain puisque la taille moyenne des grains dans les métaux et alliages des stents varie entre $10 \mu\text{m}$ et $30 \mu\text{m}$.

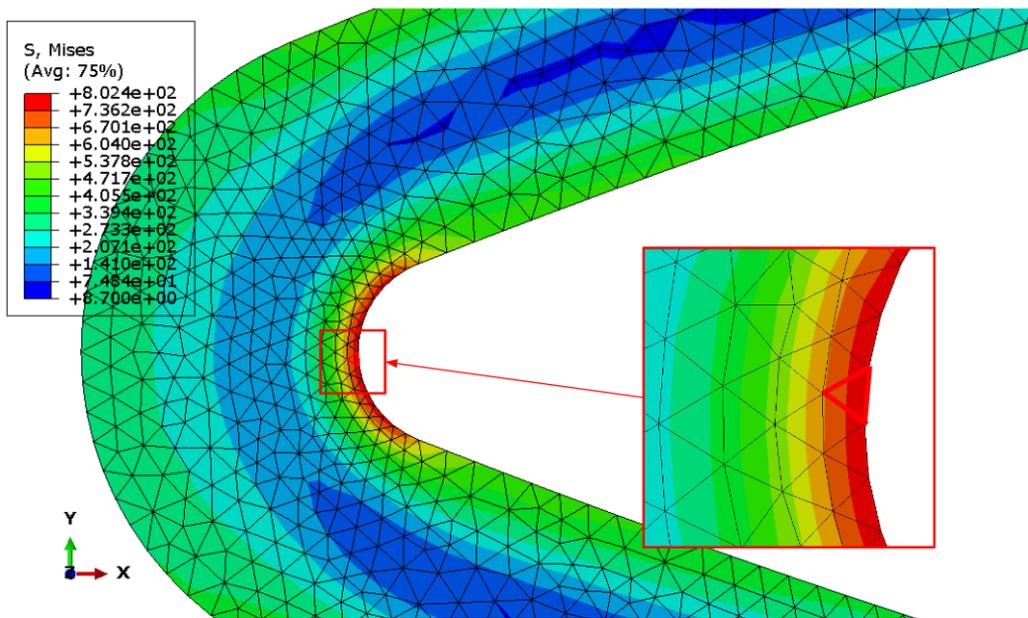


FIGURE 7.8 – Zone \mathcal{A} : Élément du coude de la zone la plus sollicitée du stent

La zone \mathcal{B} , représentée figure 7.9, correspond à un élément situé au milieu du coude, dans une région moyennement sollicitée. Notons que la zone \mathcal{B} est plus grande que la zone \mathcal{A} , et ses dimensions indiquent qu'elle est constituée d'environ 6 grains.

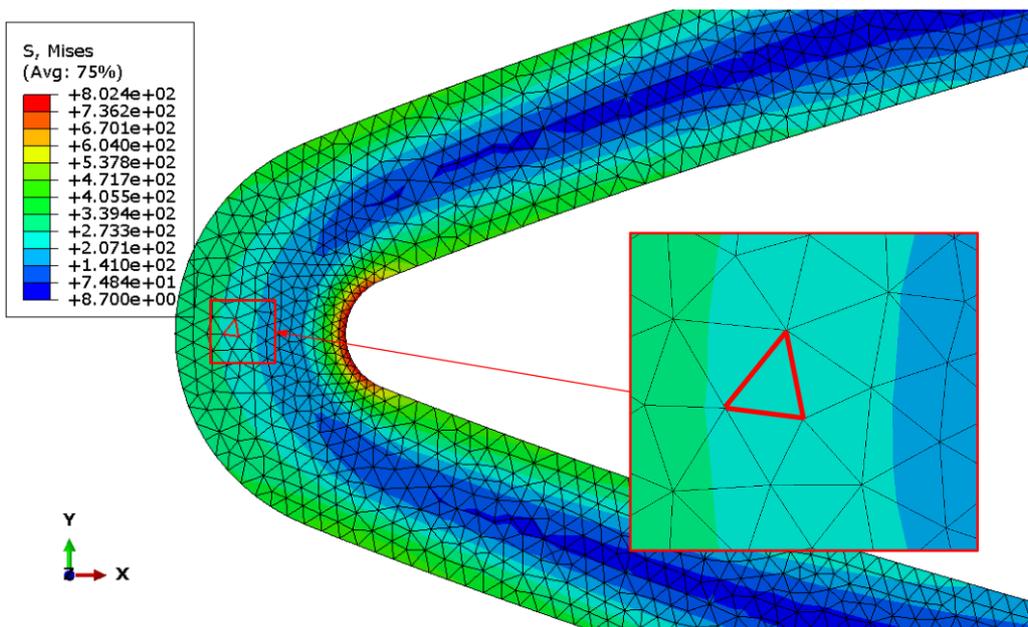


FIGURE 7.9 – Zone \mathcal{B} : Élément du milieu du coude (région moyennement sollicitée)

Sur chacune des zones \mathcal{A} et \mathcal{B} , les champs de contrainte sont considérés uniformes. Les tenseurs de contrainte moyenne ont été extraits du calcul *ABAQUS* et injectés

dans le modèle mésoscopique afin d'obtenir le nombre de cycle à rupture correspondant. On considère dans la suite que la zone \mathcal{A} est constituée d'un seul grain, tandis que la zone \mathcal{B} est constituée du polycristal à 6 grains, généré par Neper et représenté figure 7.10. Le grain en rouge sur cette figure indique la position du grain qui sera considéré dans la suite.

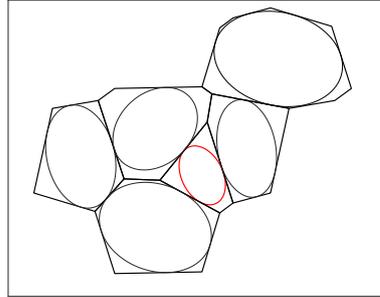


FIGURE 7.10 – Polycristal dans la zone \mathcal{B}

7.4 Résultats et discussion

Le but est de mettre en évidence l'influence de la microstructure du stent sur sa tenue en fatigue. Des idées préliminaires sur le comportement du stent peuvent être déduites de l'analyse de sensibilité présentée au chapitre 6 et validée dans ce qui suit.

7.4.1 Influence de l'orientation cristalline

En se concentrant dans un premier temps sur la zone \mathcal{A} constituée d'un seul grain, on tire aléatoirement la taille, la forme et l'orientation cristalline du grain suivant des distributions de lois normales. L'histogramme de nombre de cycles à rupture pour 10 000 simulations est présenté à la figure 7.11a. Il est comparé au cas où l'orientation seule est considérée comme variable aléatoire (cf. figure 7.11b). La forme du grain utilisée dans ce cas est celle du grain rouge à la figure 7.10.

Les médianes et écarts types sont résumés dans le tableau 7.1 où N_f^{Total} est la médiane lorsque l'on considère toutes les durées de vie y compris les durées infinies, alors que N_f^{Finis} est la médiane lorsqu'on exclue les durées de vie infinies.

Configuration	Médiane (N_f^{Total})	Médiane (N_f^{Finis})	Écart type
1	3.73×10^8	3.67×10^8	9.32×10^7
2	3.18×10^8	3.11×10^8	1.42×10^8

TABLE 7.1 – Résumé des résultats statistiques de 7.11

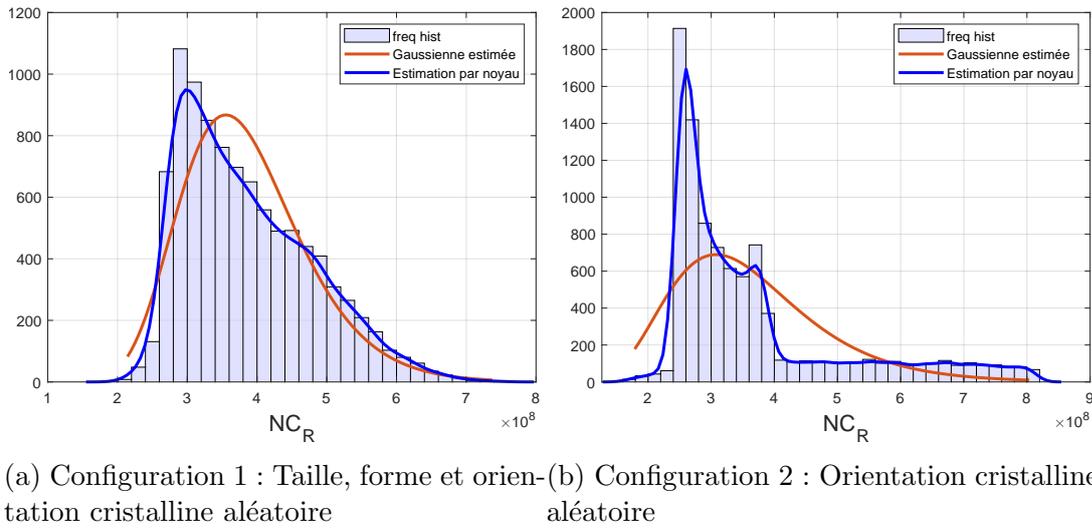


FIGURE 7.11 – Histogrammes de nombre de cycles à rupture pour deux configurations différentes.

Ces observations révèlent que la durée de vie médiane du stent diminue de 14% lorsqu'on considère uniquement l'orientation cristalline comme variable. Cette diminution s'explique par le fait qu'en maintenant la taille et la forme constantes dans la deuxième configuration, on néglige des situations favorables à une durée de vie plus longue, comme souligné dans l'analyse de sensibilité précédente. La dispersion, quant à elle, semble principalement due à l'orientation cristalline (les écarts types entre les deux configurations sont du même ordre de grandeur). On peut donc affirmer que l'orientation cristalline joue un rôle prédominant dans la dispersion de la durée de vie.

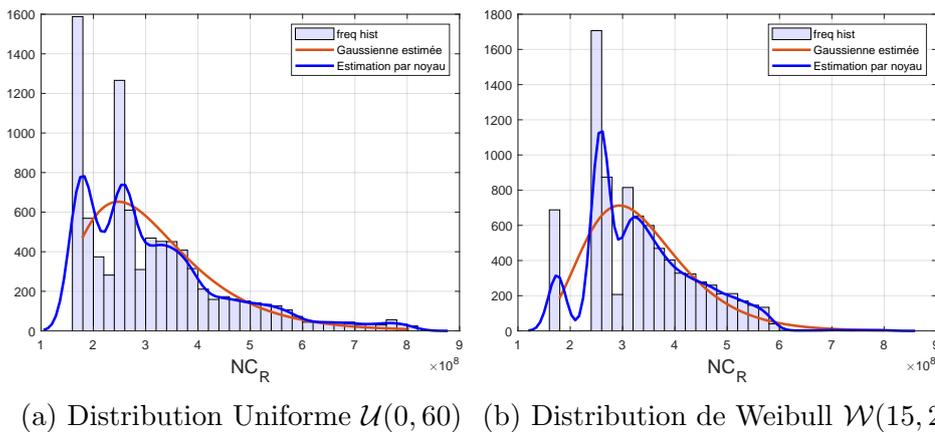


FIGURE 7.12 – Histogrammes de nombre de cycles à rupture pour deux distributions de lois de probabilité différentes.

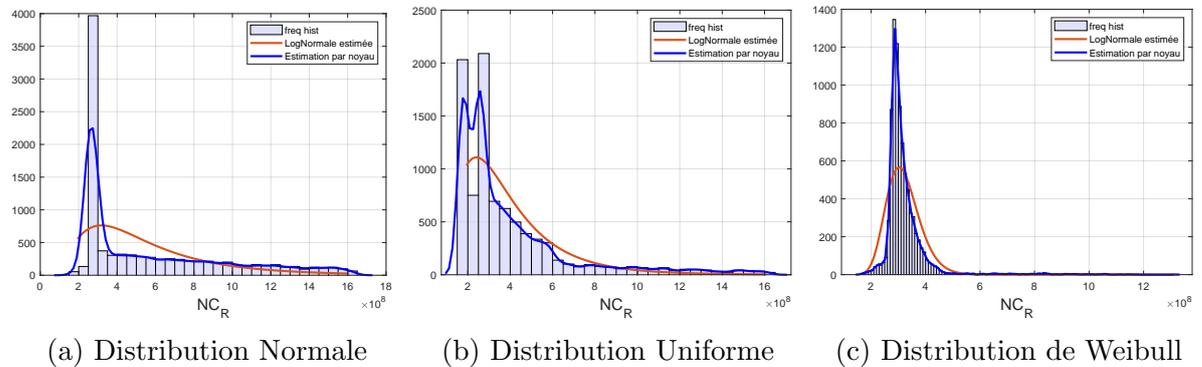
Distribution	Médiane (N_f^{Total})	Médiane (N_f^{Finis})	Écart type
$\mathcal{N}(30, 8)$	3.18×10^8	3.11×10^8	1.42×10^8
$\mathcal{U}(0, 60)$	3.00×10^8	2.69×10^8	1.38×10^8
$\mathcal{W}(15, 2)$	3.42×10^8	3.20×10^8	1.02×10^8

TABLE 7.2 – Résumé des résultats statistiques de la figure 7.12.

Comme illustré à la figure 7.12, le modèle mésoscopique permet de calculer les histogrammes de durée de vie pour différentes distributions statistiques de l'orientation cristalline. Dans les cas testés, le meilleur fit des histogrammes de sortie est obtenu avec une densité de probabilité Log-normale.

7.4.2 Influence du nombre de grains

Pour mettre l'influence du nombre de grains en évidence, on compare les durées de vie des zones \mathcal{A} et \mathcal{B} pour un même niveau de chargement (choisi comme celui appliqué sur la zone \mathcal{B} dans le calcul éléments finis). La figure 7.13 montre les histogrammes du nombre de cycles à rupture obtenus pour la zone \mathcal{A} en considérant les trois distributions d'orientation listées dans le tableau 7.12. Les histogrammes pour la zone \mathcal{B} sont représentés figure 7.14.

FIGURE 7.13 – Histogrammes du nombre de cycles à rupture pour la zone \mathcal{A} à chargement moyen.

Distribution	Médiane (N_f^{Total})	Médiane (N_f^{Finis})	Écart type
$\mathcal{N}(30, 8)$	4.25×10^8	3.79×10^8	3.92×10^8
$\mathcal{U}(0, 60)$	3.10×10^8	2.75×10^8	2.88×10^8
$\mathcal{W}(15, 2)$	3.52×10^8	3.27×10^8	1.75×10^8

TABLE 7.3 – Résumé des résultats statistiques de la figure 7.13.

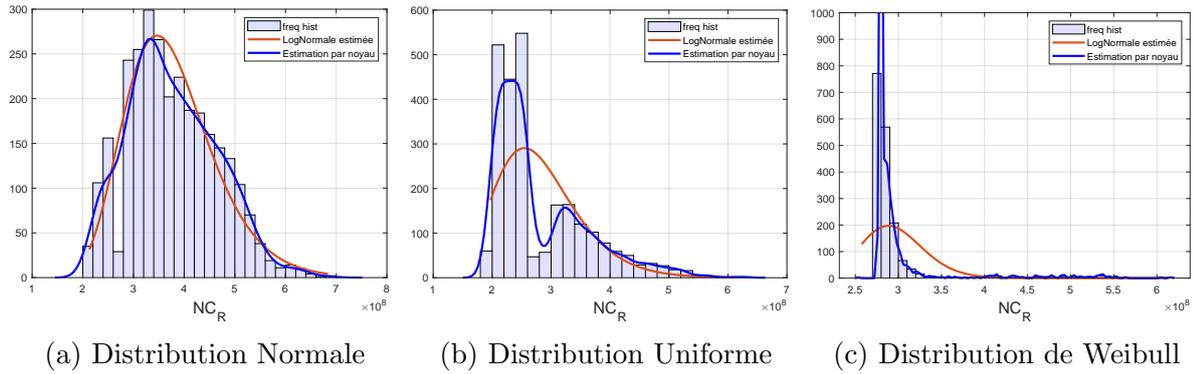


FIGURE 7.14 – Histogrammes du nombre de cycles à rupture pour la zone \mathcal{B} à chargement moyen.

Distribution	Médiane (N_f^{Total})	Médiane (N_f^{Fini})	Ecart type
$\mathcal{N}(30, 8)$	3.93×10^8	3.66×10^8	8.77×10^7
$\mathcal{U}(0, 60)$	3.11×10^8	2.50×10^8	7.93×10^7
$\mathcal{W}(15, 2)$	5.25×10^8	2.81×10^8	4.59×10^7

TABLE 7.4 – Résumé des résultats statistiques de 7.14

En comparant les deux tableaux (7.3 et 7.4) qui synthétisent les résultats statistiques des simulations, une observation émerge : la résistance à la fatigue ainsi que la variabilité du nombre de cycles à rupture diminuent à mesure que le nombre de grains augmente, pour toutes les distributions examinées. Cette tendance s'explique par le fait que l'accroissement du nombre de grains entraîne une augmentation de la probabilité d'avoir un grain critique présentant une orientation défavorable par rapport à la sollicitation appliquée.

7.4.3 Influence entre grains voisins

Afin de mieux comprendre comment l'orientation cristalline des grains voisins impacte la résistance à la fatigue du grain critique, on examine les cartes d'orientations cristallines du polycristal. Nous analysons ces cartes dans le cadre des simulations générant les durées de vie les plus grandes, ainsi que celles associées aux durées de vie les plus courtes. La figure 7.15 montre les cartes d'orientation correspondant à 6 des configurations les plus défavorables parmi les 3500 simulations effectuées. De façon similaire, la figure 7.16 présente 6 des configurations les plus favorables. Pour une meilleure interprétation de ces cartes, des exemples de l'évolution du glissement plastique cumulé sont tracés figure 7.17.

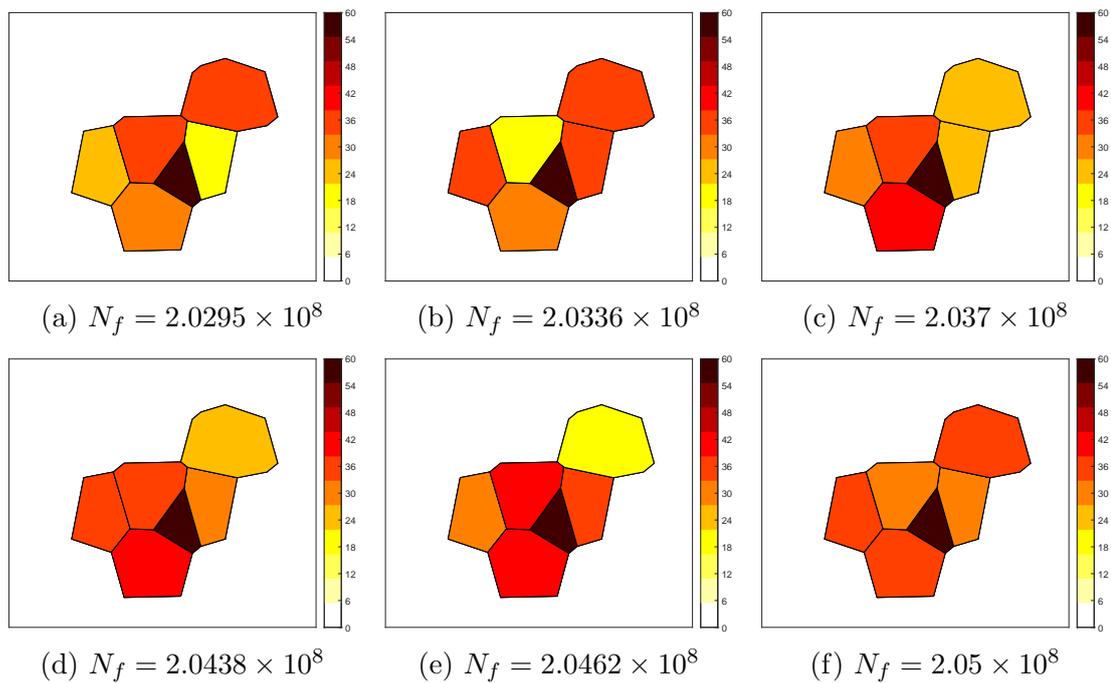


FIGURE 7.15 – Cartes d'orientation cristalline pour les six pires configurations des 3500 tirages.

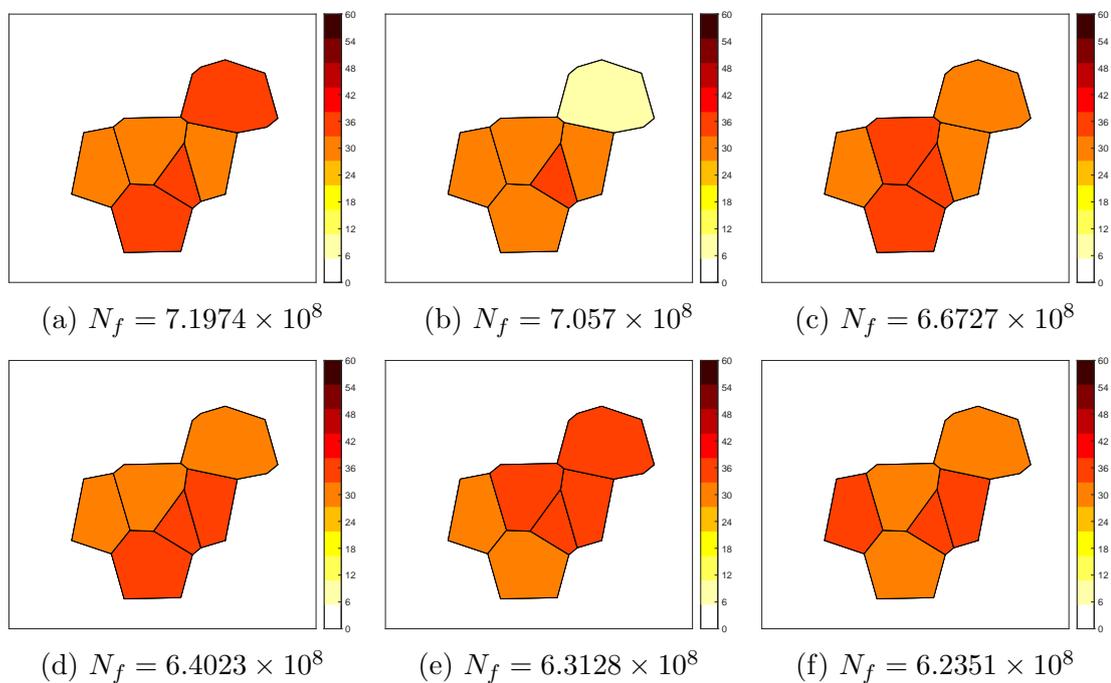


FIGURE 7.16 – Cartes d'orientation cristalline pour les six meilleures configurations des 3500 tirages.

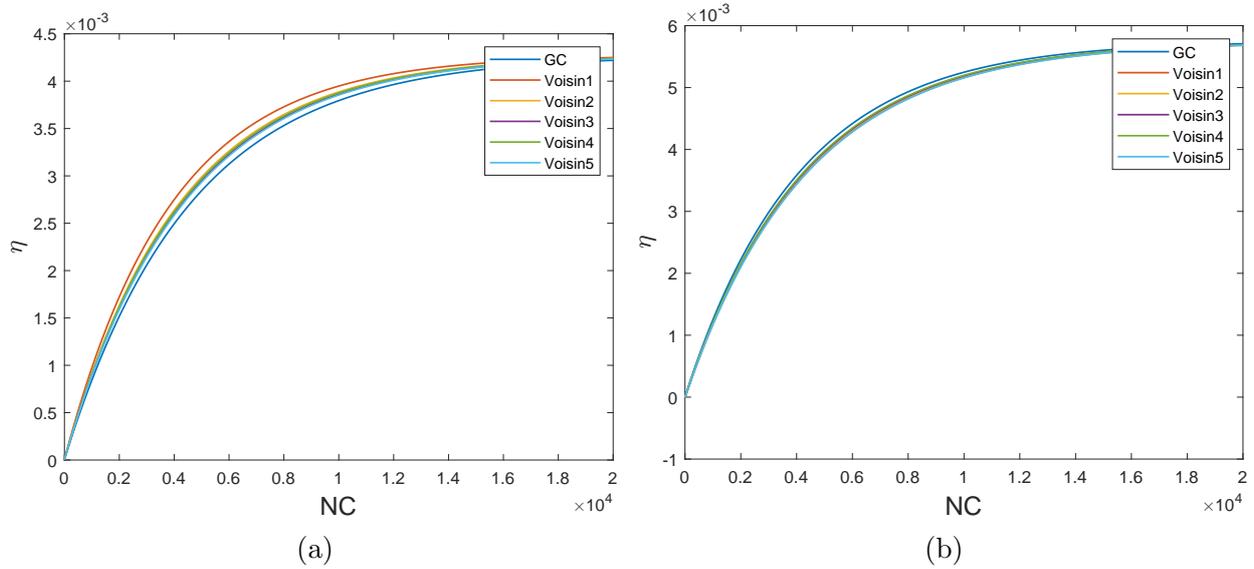


FIGURE 7.17 – (a) GP cumulé pour la configuration figure 7.15c, (b) GP cumulé pour la configuration figure 7.16f

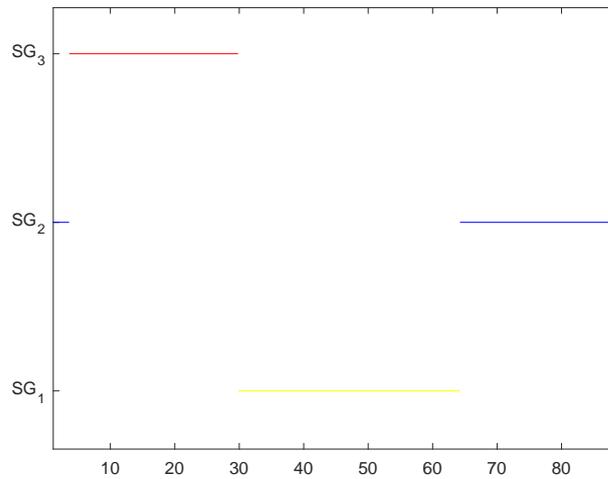


FIGURE 7.18 – Système de glissement activé en fonction de l'orientation cristalline

Le grain critique est le même dans toutes les configurations (pour éliminer l'effet de la taille) et il s'active en premier lieu selon son système de glissement le plus vulnérable. Par conséquent, il détermine l'ordre de grandeur du nombre de cycles avant la rupture. Néanmoins, cela ne signifie pas que des différences significatives en termes de N_f n'existent pas pour une même orientation cristalline. En effet, dans les configurations de la figure 7.15, on constate qu'il existe au moins un grain présentant un glissement plastique cumulé stabilisé supérieur à celui du grain critique, comme représenté figure 7.17. Les grains voisins du grain critique accumulent des glissements

plastiques de manière de plus en plus importantes au fil des cycles, même s'ils ne sont pas les premiers à glisser dans le VER. Cette tendance contribue à réduire la résistance à la fatigue du polycristal.

Cet effet est confirmé lorsqu'on examine les six configurations les plus optimales (cf. figure 7.16) en terme de durée de vie. Dans ce cas, aucun grain voisin ne dépasse le grain critique en terme de glissement plastique cumulé stabilisé (cf. figure 7.17). Notons également que, par rapport aux pires configurations de la figure 7.15, les orientations cristallines sont beaucoup plus proches les unes des autres. Il est cependant important de mentionner que, bien que les cartes puissent sembler uniformes, de légères variations dans l'orientation cristalline engendrent des écarts substantiels en termes de nombre de cycles à rupture.

Dans un élément à plusieurs grains, la durée de vie en fatigue est fortement influencée par le nombre de grains, ce que l'on peut associer à l'intensité du gradient de contrainte. En effet la taille du VER doit correspondre à une zone où les contraintes sont relativement uniformes. Ainsi la probabilité d'avoir un grain défavorablement orienté par rapport au chargement est plus élevée dans un grand VER comportant de nombreux grains, ce qui réduit son espérance de durée de vie. Il faut cependant tenir compte dans cette analyse de la taille de grains qui a une influence directe sur le nombre de grains dans le VER, car comme on l'a vu l'effet Hall-Petch joue un rôle sur la durée de vie.

7.5 Conclusion

Dans ce chapitre d'application, nous avons mis en oeuvre notre modèle mésoscopique rapide sur une structure réelle et nous l'avons utilisé pour mener une étude statistique. Ce travail a permis d'établir des liens entre les caractéristiques de la microstructure (orientation cristalline, nombre de grains dans les VER, interaction des grains voisins) et la loi de probabilité du nombre de cycles à rupture. Dans la dispersion des nombres de cycles à rupture, l'orientation cristalline joue un rôle de premier plan. Le nombre de grains présents dans le VER d'étude est étroitement lié à la probabilité d'existence du maillon faible, ce qui a une incidence directe sur la résistance à la fatigue. En effet, plus le nombre de grains est élevé, plus la présence d'un grain critique à orientation la plus défavorable dans le VER est probable, et plus la durée de vie du polycristal est petite. D'autre part, l'interaction entre les grains dans un polycristal exerce un effet important et peut selon les cas diminuer ou augmenter la durée de vie.

Chapitre 8

Conclusion générale

Ce travail a pour but l'exploration de l'impact de la microstructure sur la tenue en fatigue. On se focalise sur des volumes élémentaires représentatifs (VER) en construisant un modèle mésoscopique rapide de plasticité cristalline pour relier les caractéristiques microstructurales au nombre de cycles à rupture (considéré comme le moment d'amorçage d'une fissure). Ce modèle a été examiné sous diverses configurations de microstructures, et ensuite appliqué à une situation concrète.

La première étape a été de considérer un modèle préliminaire d'étude pour d'abord valider la faisabilité et l'efficacité de notre approche énergétique avant de s'engager dans une étude plus complexe et coûteuse. Le modèle établi pour une inclusion du type Eshelby offre une formule de récurrence explicite qui permet de calculer l'évolution des glissements plastiques et des glissements cumulés au fil des cycles de chargement. Ces deux termes calculés jouent un rôle central dans la quantification de la durée de vie en fatigue. Une comparaison avec une analyse en plasticité cristalline par éléments finis a montré que la méthode proposée identifie correctement le système de glissement activé et fournit une estimation acceptable des glissements plastiques tant que les chargements considérés restent de faible amplitude. Cette méthode présente l'avantage d'être rapide en termes de temps de calcul, permettant typiquement de calculer des évolution sur 10^6 cycles en moins d'une seconde. Ce premier modèle simplifié peut être utilisé avec confiance dans les cas où les grains critiques sont assez éloignés les uns des autres dans le VER.

Afin d'en améliorer la précision, le modèle a été ensuite étendu pour prendre en compte les interactions entre grains : le champ de contrainte généré par un grain s'étend en effet aux grains adjacents, influençant ainsi leur déformation plastique. Dans la nouvelle approche adoptée, cette interaction est prise en compte en introduisant des coefficients d'interaction α_{kl} dépendant des caractéristiques du matériau, de la forme et de la taille des grains. On trouve alors une nouvelle condition de stationnarité cette

fois assez complexe à résoudre analytiquement (et coûteuse numériquement). En supposant une interaction faible, nous parvenons à obtenir des expressions analytiques plus simple permettant de faciliter le calcul de la réponse du polycristal en corrigeant les glissements plastiques sur les grains critiques par le biais des coefficients d'interaction. Comme pour l'inclusion de type Eshelby le modèle proposé a été validé par des simulations par éléments finis, d'abord dans un cas simple de deux grains plongés dans une matrice élastique, puis dans un cas plus complexe d'une tessellation complète, démontrant ainsi que les erreurs concernant les grains critiques sont réduites pour les grains vérifiant les hypothèses d'interaction faible.

Pour s'approcher davantage du comportement réel des polycristaux, on a introduit une loi d'érouissage à 3 phases issue d'une analyse des dislocations. Le modèle mésoscopique a été mis à jour et prend en compte les trois réponses possibles des grains (adaptation, accommodation et rochet). Le modèle ainsi obtenu a été utilisé pour une analyse de sensibilité de la durée de vie vis à vis des paramètres microstructuraux. Cette étude a montré que l'orientation cristalline joue le rôle le plus déterminant dans la reproduction de la dispersion observée sur les courbes $S-N$ expérimentales. L'effet de la taille des grains (conformément à la loi de Hall-Petch) est également bien reproduit, mais il n'est significatif que pour la phase III de la courbe d'érouissage (rochet). En revanche, l'inclinaison de l'ellipse approximant la forme du grain a très peu d'impact sur la dispersion des courbes, cette dispersion tendant à se réduire et même s'éliminer pour les faibles chargements. L'interaction cruciale entre l'orientation cristalline et la géométrie des grains dans le comportement des polycristaux est également illustrée, confirmant les constats existants dans la littérature selon lesquels la forme aplatie des grains induit une compétition entre l'effet de leur orientation cristalline et le chargement. Cette analyse établit ainsi un premier lien entre la microstructure d'un polycristal et sa probabilité de rupture. Des formules analytiques directes asymptotique (donnant le glissement plastique stabilisé sans calculer tous les cycles précédents) ont pu être obtenues dans le cas où les interactions ne sont pas prises en compte. L'applicabilité de ces formules en conjonction avec un critère de fatigue microscopique inspiré de l'approche du plan critique de Dang Van a été exploré à travers une étude probabiliste. Cette étude visait à examiner l'impact des paramètres microscopiques intuitivement pertinents (en se basant aussi sur les résultats de l'analyse de sensibilité), tels que la taille et la forme des grains, leur orientation cristalline et le nombre de grains à l'intérieur de l'élément volumique étudié (VER). Nos observations ont mis en évidence le rôle significatif des formes spécifiques de grains dans la tenue en fatigue. Une fonction de survie a été établie pour un seul grain critique à

orientation aléatoire afin d'évaluer sa performance en fatigue en fonction de l'orientation cristalline. Par ailleurs, nous avons obtenu une fonction de survie à l'échelle du polycristal, en supposant que les orientations cristallines sont indépendantes pour les grains critiques. Cette approche met en avant l'influence du nombre des grains sur la densité de probabilité de survie.

A titre d'application, le modèle mésoscopique rapide a été appliqué à une structure, permettant d'établir des relations entre les caractéristiques de la microstructure citées antérieurement et la dispersion des cycles de rupture. L'orientation cristalline occupe une position centrale dans cette dispersion s'alignant ainsi avec les résultats des formules analytiques et de l'analyse de sensibilité. Le nombre de grains présents dans le VER étudié est étroitement lié à la probabilité de présence du maillon faible, ce qui impacte directement la résistance à la fatigue. En effet, à mesure que le nombre de grains augmente, la probabilité d'avoir un grain critique avec une orientation défavorable dans le VER augmente, ce qui diminue la durée de vie du polycristal. Par ailleurs, l'interaction entre les grains exerce un effet significatif sur le polycristal en fonction de l'orientation cristalline des grains voisins. Cette interaction tend soit à s'opposer à l'effet du nombre de grains en augmentant sa durée de vie, soit à réduire cette durée. Ceci explique ainsi la diminution de la durée de vie lors du passage à un VER avec davantage de grains. Les configurations microstructurales les plus défavorables vis-à-vis du chargement ont aussi été identifiées.

Des investigations complémentaires ont été abordées pour étendre le modèle, notamment l'intégration des cas spécifiques des grains en proximité de la surface libre de l'éprouvette ou de la structure. L'approche énergétique a été développée dans l'annexe A, se fondant sur l'inclusion d'Eshelby dans un demi-espace. L'une de nos perspectives est d'incorporer cette approche pour enrichir notre modèle, engendrant ainsi un nouveau paramètre microstructural, à savoir la distance des grains critiques par rapport à la surface libre. On pourra ainsi s'intéresser à son influence sur la durée de vie en fatigue. Le modèle analytique présenté dans les premiers chapitres peut être extrapolé en 3D via une formulation numérique, en considérant les trois angles d'Euler définissant l'orientation cristalline du grain, l'approximation ellipsoïdale en 3D et en incluant les 24 systèmes de glissement possibles (cf. annexe B). Une validation tridimensionnelle de ce modèle au moyen des éléments finis serait une étape intéressante à envisager.

Annexe A

Inclusion elliptique dans un demi-plan élastique isotrope

Pour examiner la possibilité d'amorçage de fissures à partir d'inclusions en surface, il devient indispensable d'examiner le cas où une surface libre existe au sein du domaine d'étude (VER) sélectionné.

Dans ce contexte, nous considérons un demi-plan Ω contenant une inclusion I , qui se trouve à une distance c d'une surface libre \mathcal{S} . Dans cette configuration, le champ de contraintes au sein de l'inclusion I , engendré par une sollicitation macroscopique, perd sa nature uniforme en raison de la présence de la surface libre. Du fait que l'hypothèse d'uniformité qui a été employée dans les chapitres antérieurs pour résoudre le problème n'est plus valide dans ce scénario, il devient nécessaire d'établir la moyenne du glissement plastique à l'intérieur de l'inclusion de manière différente.

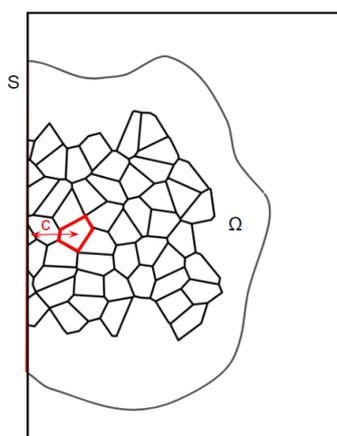


FIGURE A.1

On reprend la description complexe de la forme et position d'une inclusion ellip-

tique à partir de l'origine définie sur la surface libre du polycristal comme explicité dans l'article [129] :

$$t = h + r(e^{i\theta} + be^{-i\theta}) \quad (\text{A.1})$$

Avec h la distance du centre d l'ellipse de l'origine du repère situé sur \mathcal{S} et θ l'orientation de l'ellipse.

Les potentiels utilisés dans ce qui suit sont les potentiels de Kolosov-Muskhelishvili nous permettent de représenter les champs de contrainte et de déplacement. Ils font référence aux fonctions potentielles introduites par les mathématiciens Kolosov et Muskhelishvili [130], utilisées pour résoudre des problèmes de la théorie de l'élasticité (étude des déformations près de bords, de coins, d'inclusions et de discontinuités).

En mettant en œuvre cette approche, il devient possible de représenter les déplacements et les contraintes en termes de deux fonctions complexes distinctes.

On peut retrouver les expressions de la déformation et des contraintes dans l'inclusion en fonction des potentiels de Kolosov-Muskhelishvili (K-M) :

$$u_1 + iu_2 = \frac{1}{2\mu} [k\gamma(z) - z\gamma'(z) - \psi(\bar{z})]$$

$$\begin{cases} \sigma_{11} + \sigma_{22} = 2 [\gamma'(z) - \gamma'(\bar{z})] \\ \sigma_{22} - \sigma_{11} + 2i\sigma_{12} = 2 [\bar{z}\gamma''(z) + \psi'(z)] \end{cases}$$

$$\begin{cases} \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} = \frac{k-1}{2\mu} [\gamma'(z) - \gamma'(\bar{z})] \\ \varepsilon_{22} - \varepsilon_{11} + 2i\varepsilon_{12} = \frac{1}{\mu} [\bar{z}\gamma''(z) + \psi'(z)] \end{cases}$$

Avec :

$$k = \begin{cases} \frac{3-\nu}{1+\nu} & \text{En cas de contrainte plane,} \\ k = 3 - 4\nu & \text{En cas de déformation plane} \end{cases}$$

Les valeurs de ces potentiels sont explicitement formulés pour le cas d'une ellipse aléatoirement orienté dans un demi espace en fonction des paramètres C_1 et C_2 qui sont directement liés aux déformations plastiques :

$$C_1 = \frac{8\mu}{k+1}(\varepsilon_{11}^* + \varepsilon_{22}^*); \quad C_2 = \frac{8\mu}{k+1}(\varepsilon_{22}^* - \varepsilon_{11}^* + 2i\varepsilon_{12}^*)$$

Ces potentiels peuvent être discrétisés en deux parties : (∞) Les solutions correspondantes au problème d'Eshelby dans un espace infini, (b) Solutions du problème auxiliaire de la valeur limite concernant le domaine borné :

$$\gamma = \gamma^\infty + \gamma^b, \quad \psi = \psi^\infty + \psi^b \quad (\text{A.2})$$

Selon l'article (Lee, Zou, Ren) on retrouve les expressions explicites de chaque potentiel.

Pour un point appartenant à l'inclusion on a :

$$t = h + r(e^{i\theta} + be^{i\theta}) \quad 0 \leq \theta \leq 2\pi, \quad b = \eta e^{2i\theta_0}$$

Avec $r(1 + \eta)$ et $r(1 - \eta)$ la longueur des demi-axes de l'ellipse/inclusion.

Les potentiels (∞) s'écrivent :

$$\begin{cases} \gamma^{\infty, I}(z) = -\frac{C_1 z}{8} + \frac{\bar{C}_2}{8} [\bar{h} + (z - h)\bar{b}], \\ \psi^{\infty, I}(z) = -\frac{C_2 z}{8} + \frac{2C_1 - \bar{C}_2 \bar{b}}{8} [\bar{h} + (z - h)\bar{b}] \end{cases}$$

La solution explicite du problème auxiliaire de la valeur limite concernant le domaine borné :

$$\begin{aligned} \gamma^b(z) = & -\frac{C_1(1 - b\bar{b})(z - \bar{h})}{8\eta\bar{b}} \left[1 - \sqrt{1 - \bar{b} \left(\frac{2r}{z - \bar{h}} \right)^2} \right] \\ & + \frac{C_2}{8\eta} \left[\frac{1 - b^2\bar{b}^2}{2\bar{b}^2}(z - \bar{h}) - \frac{1 - b\bar{b}}{2\bar{b}}(z - h) \right] \\ & + \frac{C_2}{8\eta} \left[\frac{1 - b\bar{b}}{2\bar{b}}(z - h) - \frac{1 - b^2\bar{b}^2}{2\bar{b}^2}(z - \bar{h}) + \frac{(1 - b^2\bar{b}^2)r^2}{\bar{b}(z - \bar{h})} \right] \left[1 - \bar{b} \left(\frac{2r}{z - \bar{h}} \right)^2 \right]^{-1/2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi^b(z) = & -\frac{\eta C_2(1 - b\bar{b})(z - \bar{h})}{16\bar{b}} \left[1 - \sqrt{1 - \bar{b} \left(\frac{2r}{z - \bar{h}} \right)^2} \right] \\ & + \frac{C_1(1 - b\bar{b})z}{8\eta\bar{b}} \left[1 - \left[1 - \bar{b} \left(\frac{2r}{z - \bar{h}} \right)^2 \right]^{-1/2} \right] - \frac{C_2}{8\eta} \left[\frac{1 - b^2\bar{b}^2}{2\bar{b}^2} - \frac{1 - b\bar{b}}{2\bar{b}} \right] z \\ & - \frac{C_2 z}{8\eta} \left[\frac{1 - b\bar{b}}{2\bar{b}} - \frac{1 - b^2\bar{b}^2}{2\bar{b}^2} + \frac{(1 - b^2\bar{b}^2)r^2}{\bar{b}} \right] \left[1 - \bar{b} \left(\frac{2r}{z - \bar{h}} \right)^2 \right]^{-1/2} \\ & - \frac{C_2 z}{8\eta} \left[\frac{1 - b\bar{b}}{2\bar{b}}(z - h) - \frac{1 - b^2\bar{b}^2}{2\bar{b}^2}(z - \bar{h}) + \frac{(1 - b^2\bar{b}^2)r^2}{\bar{b}(z - \bar{h})} \right] \left[-\frac{4\bar{b}r^2}{(z - \bar{h})^3} \right] \left[1 - \bar{b} \left(\frac{2r}{z - \bar{h}} \right)^2 \right]^{-3/2} \end{aligned}$$

Maintenant que ψ^b et γ^b sont entièrement définies pour un point donné, noté z , situé à l'intérieur de l'inclusion, les dérivées premières et deuxième de ψ et γ deviennent, par conséquent, accessibles. Cette étape cruciale de la résolution permet d'établir les bases nécessaires au calcul des contraintes et des déplacements en tout

point de l'inclusion, ouvrant ainsi la voie au calcul d'une moyenne sur le glissement plastique.

Un des perspectives de notre étude est d'inclure une étape d'identification des grains critiques en surface et de prendre en compte des modifications présentées ci-dessus.

Annexe B

Passage d'un modèle bidimensionnel à un modèle tridimensionnel et ses implications

Bien que la modélisation bidimensionnelle puisse offrir des aperçus du comportement du polycristal, il est essentiel de reconnaître que la réalité est tridimensionnelle. Par conséquent, l'introduction d'une troisième dimension s'avère indispensable pour obtenir une représentation plus précise. L'objectif de cette annexe est de mettre en évidence l'importance du passage d'un modèle bidimensionnel à un modèle tridimensionnel en analysant les conséquences que cela entraîne sur les calculs.

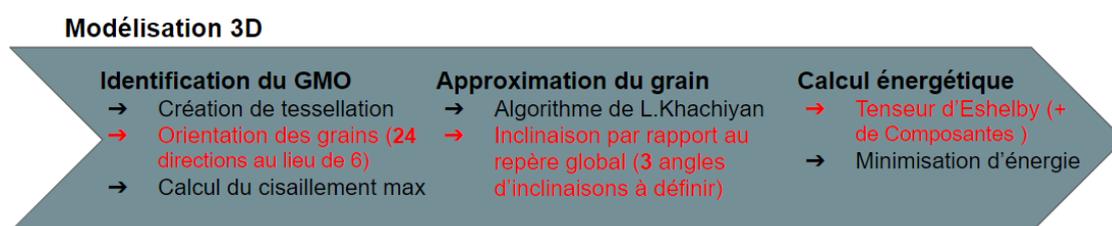


FIGURE B.1 – Processus du passage du modèle 2D au modèle 3D

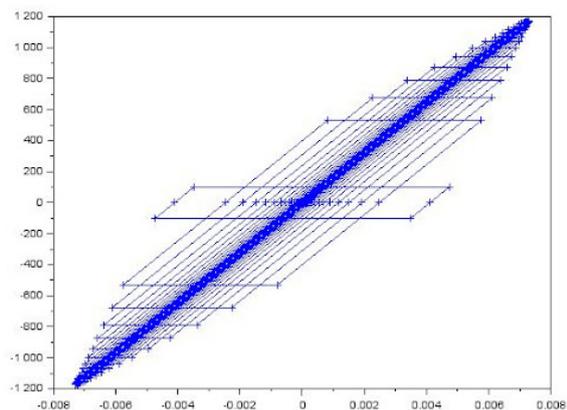
Une des distinctions les plus notables entre les calculs en deux dimensions (2D) et en (3D) réside dans la manière dont l'orientation cristalline du grain est définie. En 3D, elle devient dépendante des trois angles d'Euler, ce qui permet de définir 24 directions possibles pour les systèmes de glissement du grain.

L'algorithme de Khachiyani [101] s'avère particulièrement adapté pour toute approche en 3D, car il définit l'inclinaison de l'ellipsoïde en fonction de trois angles dans le repère global du calcul.

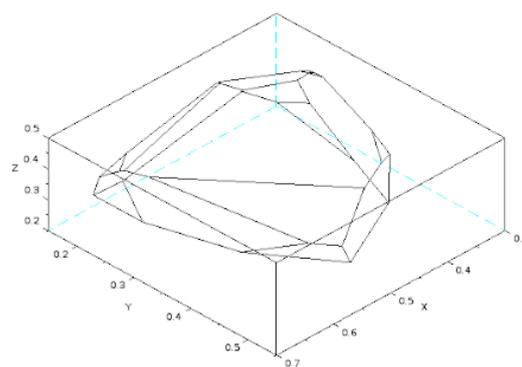
Cette augmentation de dimension entraîne également une complexification du tenseur

d'Eshelby, dont la définition sera présentée dans l'annexe suivante.

Des premiers résultats en 3D sont illustrés ci-dessous notamment l'identification du grain mal orienté ou grain critique B.2b et l'évolution de la contrainte en fonction de la déformation du grain critique B.2a dans le cas le plus simple (Loi d'écroutissage linéaire et sans interaction).



(a)



(b)

FIGURE B.2 – Résultats préliminaires du modèle 3D

Annexe C

Tenseur d'Eshelby

C.1 Tenseur d'Eshelby pour des inclusions bidimensionnelles :

En considérant qu'un grain donné d'un polycristal plan est défini sous forme d'un cylindre elliptique (c'est-à-dire un ellipsoïde caractérisé par ses demi-axes, où $a \geq b \geq c$ et où la dimension de l'axe le plus court du cylindre tend vers l'infini ($c \rightarrow \infty$)). Cette configuration est clairement décrite dans le livre de référence de T. Mura [90]. En conséquence, les expressions des éléments du tenseur d'Eshelby se simplifient :

$$\begin{aligned} S_{1111} &= \frac{1}{2(1-\nu)} \left(\frac{b^2 + 2ab}{(a+b)^2} + (1-2\nu) \frac{b}{a+b} \right), \\ S_{2222} &= \frac{1}{2(1-\nu)} \left(\frac{a^2 + 2ab}{(a+b)^2} + (1-2\nu) \frac{a}{a+b} \right), \\ S_{3333} &= 0, \\ S_{1122} &= \frac{1}{2(1-\nu)} \left(\frac{b^2}{(a+b)^2} - (1-2\nu) \frac{b}{a+b} \right), \\ S_{2233} &= \frac{1}{2(1-\nu)} \frac{2\nu a}{a+b}, \quad S_{3311} = 0, \\ S_{1133} &= \frac{1}{2(1-\nu)} \frac{2\nu b}{a+b}, \quad S_{2211} = \frac{1}{2(1-\nu)} \left(\frac{a^2}{(a+b)^2} - (1-2\nu) \frac{a}{a+b} \right), \\ S_{1212} &= \frac{1}{2(1-\nu)} \left(\frac{a^2 + b^2}{2(a+b)^2} + \frac{1-2\nu}{2} \right), \quad S_{3322} = 0, \\ S_{2323} &= \frac{a}{2(a+b)}, \quad S_{3131} = \frac{b}{2(a+b)}. \end{aligned}$$

C.2 Tenseur Eshelby pour des inclusions tridimensionnelles

La forme de l'expression du tenseur d'Eshelby pour une inclusion ellipsoïdale générale, où les demi-axes sont tels que $a > b > c$, s'écrit sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} 8\pi(1-\nu)S_{1111} &= 3a^2I_{11} + (1-2\nu)I_1, \\ 8\pi(1-\nu)S_{1122} &= b^2I_{12} - (1-2\nu)I_1, \\ 8\pi(1-\nu)S_{1133} &= c^2I_{13} - (1-2\nu)I_1, \\ 16\pi(1-\nu)S_{1212} &= (a^2 + b^2)I_{12} + (1-2\nu)(I_1 + I_2). \end{aligned}$$

On peut exprimer les coefficients I_i en fonction des intégrales elliptiques E et F :

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{4\pi abc}{(a^2 - b^2)(a^2 - c^2)^{1/2}} [F(\varphi, K) - E(\varphi, K)], \\ I_3 &= \frac{4\pi abc}{(b^2 - c^2)(a^2 - c^2)^{1/2}} \left[\frac{b(a^2 - c^2)^{1/2}}{ac} - E(\varphi, K) \right], \\ I_2 &= 4\pi - I_1 - I_3. \end{aligned}$$

Avec,

$$\begin{aligned} F(\varphi, K) &= \int_0^\varphi \frac{d\psi}{(1 - K^2 \sin^2 \psi)^{1/2}}, \\ E(\varphi, K) &= \int_0^\varphi (1 - K^2 \sin^2 \psi)^{1/2} d\psi \end{aligned}$$

Et,

$$\varphi = \sin^{-1} \left(1 - \frac{c^2}{a^2} \right)^{1/2}, \quad K^2 = \frac{a^2 - b^2}{a^2 - c^2}.$$

Les coefficients I_{ij} s'écrivent :

$$\begin{aligned} 3I_{11} + I_{12} + I_{13} &= \frac{4\pi}{a^2}, \\ 3a^2I_{11} + b^2I_{12} + c^2I_{13} &= 3I_1, \\ I_{12} &= \frac{I_2 - I_1}{a^2 - c^2}. \end{aligned}$$

Toute autre composante non nulle de S , I_i et I_{ij} est obtenu par permutation circulaire des indices(1,2,3).

Bibliographie

- [1] Eurocode 3 : design of steel structures : part 1-5 : plated structural elements, BSI, London, 2010, incorporating corrigendum April 2009.
- [2] C. Bathias, A. Pineau, Fatigue of materials and structures, Wiley Online Library, 2010.
- [3] F. Z. Li, C. F. Shih, A. Needleman, A comparison of methods for calculating energy release rates, *Engineering fracture mechanics* 21 (2) (1985) 405–421.
- [4] B. Budiansky, J. Rice, Conservation laws and energy-release rates, *Journal of applied mechanics* 40 (1) (1973) 201–203.
- [5] J. R. Rice, et al., Mathematical analysis in the mechanics of fracture, *Fracture : an advanced treatise* 2 (1968) 191–311.
- [6] H. M. Westergaard, Bearing pressures and cracks : Bearing pressures through a slightly waved surface or through a nearly flat part of a cylinder, and related problems of cracks.
- [7] G. R. Irwin, Analysis of stresses and strains near the end of a crack traversing a plate.
- [8] P. C. Paris, A rational analytic theory of fatigue, *Trends Engin* 13 (1961) 9–14.
- [9] F. Erdogan, G. Sih, On the crack extension in plates under plane loading and transverse shear.
- [10] C.-H. Wu, Fracture under combined loads by maximum-energy-release-rate criterion, *Journal of applied mechanics* 45.
- [11] J.-B. Leblond, Crack paths in plane situations—i. general form of the expansion of the stress intensity factors, *International Journal of Solids and Structures* 25 (11) (1989) 1311–1325.
- [12] G. A. Francfort, J.-J. Marigo, Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 46 (8) (1998) 1319–1342.

-
- [13] J.-Y. Buffière, S. Savelli, P.-H. Jouneau, E. Maire, R. Fougères, Experimental study of porosity and its relation to fatigue mechanisms of model al–si7–mg0.3 cast Al alloys, *Materials Science and Engineering : A* 316 (1-2) (2001) 115–126.
- [14] J. R. Rice, D. M. Tracey, On the ductile enlargement of voids in triaxial stress fields, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 17 (3) (1969) 201–217.
- [15] V. Monchiet, E. Charkaluk, D. Kondo, Plasticity-damage based micromechanical modelling in high cycle fatigue, *Comptes Rendus Mécanique* 334 (2) (2006) 129–136.
- [16] U. Essmann, H. Mughrabi, Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocation densities, *Philosophical Magazine A* 40 (6) (1979) 731–756.
- [17] A. Wöhler, Über die Festigkeitsversuche mit Eisen und Stahl, Ernst & Korn, 1870.
- [18] E. Castillo, A. Fernández-Canteli, A unified statistical methodology for modeling fatigue damage, Springer Science & Business Media, 2009.
- [19] J. F. Barbosa, J. A. Correia, R. Freire Junior, S.-P. Zhu, A. M. De Jesus, Probabilistic stress fields based on statistical distributions applied to metallic and composite materials : State of the art, *Advances in Mechanical Engineering* 11 (8) (2019) 1687814019870395.
- [20] O. Basquin, The exponential law of endurance tests, in : *Proc Am Soc Test Mater*, Vol. 10, 1910, pp. 625–630.
- [21] C. Stromeyer, The determination of fatigue limits under alternating stress conditions, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 90 (620) (1914) 411–425.
- [22] F. Bastenaire, New method for the statistical evaluation of constant stress amplitude fatigue-test results, in : *Probabilistic aspects of fatigue*, ASTMSTP, Vol. 511, 1971, pp. 3–28.
- [23] M. A. Miner, Cumulative damage in fatigue.
- [24] A. Palmgren, Die Lebensdauer von Kugellagern, *Verfahrenstechnik* 68 (1924) 339–341.
- [25] E. Castillo, M. López-Aenlle, A. Ramos, A. Fernández-Canteli, R. Kieselbach, V. Esslinger, Specimen length effect on parameter estimation in modelling fatigue strength by Weibull distribution, *International Journal of Fatigue* 28 (9) (2006) 1047–1058.

- [26] R. Fouchereau, G. Celeux, P. Pamphile, Probabilistic modeling of s–n curves, *International Journal of Fatigue* 68 (2014) 217–223.
- [27] N. García-Fernández, M. Aenlle, A. Álvarez-Vázquez, M. Muniz-Calvente, P. Fernández, A review on fatigue monitoring of structures, *International Journal of Structural Integrity* 14 (2) (2023) 133–165.
- [28] E. Miranda, Modélisation et caractérisation des risques extrêmes en fatigue des matériaux, Ph.D. thesis, Sorbonne université (2020).
- [29] E. Thieulot-Laure, Méthode probabiliste unifiée pour la prédiction du risque de rupture en fatigue, Ph.D. thesis, École normale supérieure de Cachan-ENS Cachan (2008).
- [30] J.-B. Cartiaux, A. Ehrlacher, F. Legoll, A. Libal, J. Reygner, Probabilistic formulation of miner’s rule and application to structural fatigue, *Probabilistic Engineering Mechanics*.
- [31] P. C. Paris, H. Tada, J. K. Donald, Service load fatigue damage—a historical perspective, *International Journal of fatigue* 21 (1999) S35–S46.
- [32] S. Pommier, M. Risbet, Time derivative equations for mode i fatigue crack growth in metals, *International Journal of Fatigue* 27 (10-12) (2005) 1297–1306.
- [33] N. Pugno, M. Ciavarella, P. Cornetti, A. Carpinteri, A generalized paris’ law for fatigue crack growth, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 54 (7) (2006) 1333–1349.
- [34] P.-Y. Decreuse, S. Pommier, L. Gentot, S. Pattofatto, History effect in fatigue crack growth under mixed-mode loading conditions, *International Journal of Fatigue* 31 (11-12) (2009) 1733–1741.
- [35] F. Fremy, S. Pommier, M. Poncelet, B. Raka, E. Galenne, S. Courtin, J.-C. Le Roux, Load path effect on fatigue crack propagation in i+ ii+ iii mixed mode conditions—part 1 : Experimental investigations, *International Journal of Fatigue* 62 (2014) 104–112.
- [36] F. Fremy, S. Pommier, E. Galenne, S. Courtin, J.-C. Le Roux, Load path effect on fatigue crack propagation in i+ ii+ iii mixed mode conditions—part 2 : Finite element analyses, *International Journal of Fatigue* 62 (2014) 113–118.
- [37] B. Crossland, Effect of large hydrostatic pressures on the torsional fatigue strength of an alloy steel, in : *Proc. Int. Conf. on Fatigue of Metals*, Vol. 138, Institution of Mechanical Engineers London, 1956, pp. 12–12.

-
- [38] G. Sines, Behavior of metals under complex static and alternating stresses, *Metal fatigue* 1 (1959) 145–169.
- [39] W. N. Findley, A theory for the effect of mean stress on fatigue of metals under combined torsion and axial load or bending, *Journal of Engineering for Industry* 81 (4) (1959) 301–305.
- [40] K. Miller, K. Zachariah, Cumulative damage laws for fatigue crack initiation and stage i propagation, *The journal of strain analysis for engineering design* 12 (4) (1977) 262–270.
- [41] T. Palin-Luc, S. Lasserre, An energy based criterion for high cycle multiaxial fatigue, *European Journal of Mechanics-A/Solids* 17 (2) (1998) 237–251.
- [42] K. Dang Van, Sur la résistance à la fatigue des métaux, *Sciences et Techniques de l'Armement* 47 (1973) 641.
- [43] K. Dang Van, Y. Papadopoulos, Multiaxial fatigue failure criterion : a new approach, *Fatigue'87*. 2 (1987) 997–1008.
- [44] K. Dang Van, Macro-micro approach in high-cycle multiaxial fatigue, in : *Advances in multiaxial fatigue*, ASTM International, 1993.
- [45] I. Papadopoulos, A high-cycle fatigue criterion applied in biaxial and triaxial out-of-phase stress conditions, *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures* 18 (1) (1995) 79–91.
- [46] K. Dang Van, Introduction to fatigue analysis in mechanical design by the multiscale approach, in : *High-cycle metal fatigue*, Springer, 1999, pp. 57–88.
- [47] K. D. Van, I. V. Paradopoulos, *High-cycle metal fatigue : from theory to applications*, Vol. 392, Springer, 2014.
- [48] E. Charkaluk, A. Constantinescu, H. Maitournam, K. Dang Van, Revisiting the Dang Van criterion, *Procedia Engineering* 1 (1) (2009) 143–146.
- [49] F. Hofmann, G. Bertolino, A. Constantinescu, M. Ferjani, Numerical exploration of the Dang Van high cycle fatigue criterion : application to gradient effects, *Journal of Mechanics of Materials and Structures* 4 (2) (2009) 293–308.
- [50] G. Bertolino, A. Constantinescu, M. Ferjani, P. Treiber, A multiscale approach of fatigue and shakedown for notched structures, *Theoretical and Applied Fracture Mechanics* 48 (2) (2007) 140–151.
- [51] D. Weisz-Patrault, Fast simulation of temperature and phase transitions in directed energy deposition additive manufacturing, *Additive Manufacturing* 31 (2020) 100990.

-
- [52] D. Weisz-Patrault, P. Margerit, A. Constantinescu, Residual stresses in thin walled-structures manufactured by directed energy deposition : In-situ measurements, fast thermo-mechanical simulation and buckling, *Additive Manufacturing* 56 (2022) 102903.
- [53] C. Guevenoux, Réparation de pièces métalliques par directed energy deposition : gradient microstructural, comportement mécanique et tenue en fatigue, Ph.D. thesis, Institut polytechnique de Paris (2021).
- [54] C. Guévenoux, S. Hallais, Y. Balit, A. Charles, E. Charkaluk, A. Constantinescu, Plastic strain localization induced by microstructural gradient in laser cladding repaired structures, *Theoretical and Applied Fracture Mechanics* 107 (2020) 102520.
- [55] F. Morel, A fatigue life prediction method based on a mesoscopic approach in constant amplitude multiaxial loading, *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures* 21 (3) (1998) 241–256.
- [56] F. Morel, A critical plane approach for life prediction of high cycle fatigue under multiaxial variable amplitude loading, *International Journal of Fatigue* 22 (2) (2000) 101–119.
- [57] M. Jabbado, H. Maitournam, A high-cycle fatigue life model for variable amplitude multiaxial loading, *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures* 31 (1) (2008) 67–75.
- [58] H. Maitournam, B. Pommier, J.-J. Thomas, Détermination de la réponse asymptotique d'une structure anélastique sous chargement thermomécanique cyclique, *Comptes Rendus Mecanique* 330 (10) (2002) 703–708.
- [59] K. V. Spiliopoulos, K. D. Panagiotou, A direct method to predict cyclic steady states of elastoplastic structures, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 223 (2012) 186–198.
- [60] T. Nguyen-Tajan, B. Pommier, H. Maitournam, M. Houari, L. Verger, Z. Du, M. Snyman, Determination of the stabilized response of a structure undergoing cyclic thermal-mechanical loads by a direct cyclic method, in : 16th ABAQUS Users Conference, Munich, 2003.
- [61] H. Maitournam, C. Krebs, A. Galtier, A multiscale fatigue life model for complex cyclic multiaxial loading, *International Journal of Fatigue* 33 (2) (2011) 232–240.

-
- [62] A. Turnbull, E. De Los Rios, The effect of grain size on fatigue crack growth in an aluminium magnesium alloy, *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures* 18 (11) (1995) 1355–1366.
- [63] S. Pommier, Arching effect in elastic polycrystals : implications for the variability of fatigue lives, *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures* 25 (4) (2002) 331–348.
- [64] S. Pearson, Initiation of fatigue cracks in commercial aluminium alloys and the subsequent propagation of very short cracks, *Engineering Fracture Mechanics* 7 (2) (1975) 235–247.
- [65] E. Ferrie, J.-Y. Buffiere, W. Ludwig, 3d characterisation of the nucleation of a short fatigue crack at a pore in a cast al alloy using high resolution synchrotron microtomography, *International Journal of Fatigue* 27 (10-12) (2005) 1215–1220.
- [66] M. Herbig, A. King, P. Reischig, H. Proudhon, E. M. Lauridsen, J. Marrow, J.-Y. Buffière, W. Ludwig, 3-d growth of a short fatigue crack within a polycrystalline microstructure studied using combined diffraction and phase-contrast x-ray tomography, *Acta Materialia* 59 (2) (2011) 590–601.
- [67] E. Orowan, Theory of the fatigue of metals, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 171 (944) (1939) 79–106.
- [68] R. J. Asaro, Micromechanics of crystals and polycrystals, *Advances in applied mechanics* 23 (1983) 1–115.
- [69] M. Kothari, L. Anand, Elasto-viscoplastic constitutive equations for polycrystalline metals : application to tantalum, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 46 (1) (1998) 51–83.
- [70] E. Schmid, W. Boas, *Kristallplastizität : mit besonderer Berücksichtigung der Metalle*, Vol. 17, Springer-Verlag, 2013.
- [71] D. Jillson, Quantitative stress-strain studies on zinc single crystals in tension, *Journal of Metals* 2 (9) (1950) 1129–1133.
- [72] G. Cailletaud, A micromechanical approach to inelastic behaviour of metals, *International Journal of Plasticity* 8 (1) (1992) 55–73.
- [73] R. Fortunier, Dual potentials and extremum work principles in single crystal plasticity, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 37 (6) (1989) 779–790.
- [74] L. Meé ric, P. Poubanne, G. Cailletaud, Single crystal modeling for structural calculations : Part 1—model presentation, *Journal of engineering materials and technology*.

-
- [75] L. Mé ric, G. Cailletaud, Single crystal modeling for structural calculations : Part 2—finite element implementation, *Journal of engineering materials and technology*.
- [76] F. Barbe, L. Decker, D. Jeulin, G. Cailletaud, Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 1 : FE model, *International journal of plasticity* 17 (4) (2001) 513–536.
- [77] F. Barbe, S. Forest, G. Cailletaud, Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 2 : Results, *International journal of plasticity* 17 (4) (2001) 537–563.
- [78] B. Fedelich, A. Ehrlacher, An analysis of stability of equilibrium and of quasi-static transformations on the basis of the dissipation function, *European journal of mechanics. A. Solids* 16 (5) (1997) 833–855.
- [79] A. Mielke, Energetic formulation of multiplicative elasto-plasticity using dissipation distances, *Continuum Mechanics and Thermodynamics* 15 (4) (2003) 351–382.
- [80] J. Bluthé, D. Weisz-Patrault, A. Ehrlacher, Energetic approach for a sliding inclusion accounting for plastic dissipation at the interface, application to phase nucleation, *International Journal of Solids and Structures* 121 (2017) 163–173.
- [81] D. Weisz-Patrault, M. Gantier, A. Ehrlacher, Mixed analytic/energetic approach for a sliding orthotropic hollow cylinder. Application to coil sagging, *International Journal of Solids and Structures* 165 (2019) 75–92.
- [82] K. Saanouni, A. Abdul-Latif, Micromechanical modeling of low cycle fatigue under complex loadings—part i. theoretical formulation, *International journal of plasticity* 12 (9) (1996) 1111–1121.
- [83] V. Bennett, D. McDowell, Polycrystal orientation distribution effects on microslip in high cycle fatigue, *International Journal of Fatigue* 25 (1) (2003) 27–39.
- [84] A. Manonukul, F. Dunne, High–and low–cycle fatigue crack initiation using polycrystal plasticity, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 460 (2047) (2004) 1881–1903.
- [85] C. Robert, N. Saintier, T. Palin-Luc, F. Morel, Micro-mechanical modelling of high cycle fatigue behaviour of metals under multiaxial loads, *Mechanics of Materials* 55 (2012) 112–129.

-
- [86] R. Guerchais, G. Scalet, A. Constantinescu, F. Auricchio, Micromechanical modeling for the probabilistic failure prediction of stents in high-cycle fatigue, *International Journal of Fatigue* 87 (2016) 405–417.
- [87] R. Guerchais, F. Morel, N. Saintier, Microstructure-dependent predictions of the effect of defect size and shape on the high-cycle fatigue strength.
- [88] M. Peigney, C. Stolz, An optimal control approach to the analysis of inelastic structures under cyclic loading, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 51 (4) (2003) 575–605.
- [89] J. D. Eshelby, The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems, in : *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, Vol. 241, The Royal Society, 1957, pp. 376–396.
- [90] T. Mura, *Micromechanics of defects in solids*, Springer Science & Business Media, 1987.
- [91] Z. A. Moschovidis, T. Mura, Two-ellipsoidal inhomogeneities by the equivalent inclusion method.
- [92] C. S. Jarali, M. Madhusudan, S. Vidyashankar, S. Raja, A new micromechanics approach to the application of eshelby’s equivalent inclusion method in three phase composites with shape memory polymer matrix, *Composites Part B : Engineering* 152 (2018) 17–30.
- [93] K. Zhou, L. M. Keer, Q. J. Wang, Semi-analytic solution for multiple interacting three-dimensional inhomogeneous inclusions of arbitrary shape in an infinite space, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 87 (7) (2011) 617–638.
- [94] K. Zhou, L. M. Keer, Q. J. Wang, X. Ai, K. Sawamiphakdi, P. Glaws, M. Paire, F. Che, Interaction of multiple inhomogeneous inclusions beneath a surface, *Computer methods in applied mechanics and engineering* 217 (2012) 25–33.
- [95] J. Zhang, Y. Huang, W. Liu, L. Wang, Interaction of multiple straight cracks and elliptical inclusions in a finite plate due to mismatched thermal expansion, *Engineering Fracture Mechanics* 238 (2020) 107267.
- [96] Y.-G. Lee, W.-N. Zou, H.-H. Ren, Eshelby’s problem of inclusion with arbitrary shape in an isotropic elastic half-plane, *International Journal of Solids and Structures* 81 (2016) 399–410.

-
- [97] S. Sakout, D. Weisz-Patruault, A. Ehrlacher, Energetic upscaling strategy for grain growth. I : Fast mesoscopic model based on dissipation, *Acta Materialia* 196 (2020) 261–279.
- [98] D. Weisz-Patruault, S. Sakout, A. Ehrlacher, Energetic upscaling strategy for grain growth. II : Probabilistic macroscopic model identified by Bayesian techniques, *Acta Materialia*.
- [99] D. Weisz-Patruault, Database upscaling strategy for grain growth, *Mendeley Data*.
- [100] D. Weisz-Patruault, S. Sakout, A. Ehrlacher, Fast simulation of grain growth based on Orientated Tessellation Updating Method, *Mechanics & Industry* 21 (5) (2020) 513.
- [101] L.G.Khachiyan, A polynomial algorithm for linear programming, *Doklady Akademii Nauk SSSR*, (244) (1979) 1093–1096.
- [102] N. Moshtagh, Minimum volume enclosing ellipsoid- matlab file.
- [103] S. Boyd, L. Vandenberghe, Schmid, *Convex Optimization*, Cambridge University Press, 2004.
- [104] A. Mutapcic, Maximum volume inscribed ellipsoid in a polyhedron.
- [105] S. Sakout, Fast simulation of grain growth based on orientated tessellation updating method and probabilistic homogenization, Ph.D. thesis (2020).
- [106] C. W. Cryer, The solution of a quadratic programming problem using systematic over-relaxation, *SIAM J. Control* (vol. 9).
- [107] A. Boriçi, H. Lütithi, Pricing American Put Options by Linear Scaling Algorithms. *Computational Methods in Decision-Making. Economics and Finance. Applied Optimization.*, Kluwer Academic Publishers, 2001.
- [108] C. Lemke, On complementary pivot theory, G.B. Dantzig and A.F. Veinott, Jr., eds., *Mathematics of the decision sciences*, Part I.
- [109] A. W. Max, Inverting modified matrices, in : *Memorandum Rept. 42*, Statistical Research Group, Princeton Univ., 1950, p. 4.
- [110] R. Quey, The documentation for neper 4.2.0 a software package for polycrystal generation and meshing, *Neper*.
- [111] A. Okabe, B. Boots, K. Sugihara, S. Chiu, *Spatial tessellations : concepts and applications of voronoi diagrams.*, John Wiley & Sons, Chichester, West Sussex, England.

- [112] H. Edelsbrunner, *Geometry and topology for mesh generation*, Cambridge University Press, Cambridge, (2001) 190.
- [113] G. Owolabi, L. Shi, H. Whitworth, A micromechanics-based fatigue damage process zone, *Procedia Engineering* 10 (2011) 496–505.
- [114] Z. Mróz, A. Seweryn, Damage description with related crack initiation and propagation conditions, *Journal de Physique IV Proceedings* 06 (C6) (1996) 529–538.
- [115] F. El Houdaigui, S. Forest, A.-F. Gourgues, D. Jeulin, On the size of the representative volume element for isotropic elastic polycrystalline copper, in : ed. Y.L. Bai, Q. Zheng, Y. Wei (Eds.), *IUTAM symposium on mechanical behavior and micro mechanics of nanostructured materials*, 27-30 juin 2005, Springer, Beijing, China, 2007, pp. 171–180, 27-30 juin 2005 ed. Y.L. Bai, Q.S. Zheng, Y.G. Wei Springer, 2007, pp. 171-180.
- [116] I. Papadopoulos, *Fatigue polycyclique des métaux*, Ph.D. thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées (1987).
- [117] L. Kubin, B. Devincre, T. Hoc, Modeling dislocation storage rates and mean free paths in face-centered cubic crystals, *Acta Materialia* 56 (20) (2008) 6040–6049.
- [118] B. Peeters, S. Kalidindi, P. Van Houtte, E. Aernoudt, A crystal plasticity based work-hardening/softening model for b.c.c. metals under changing strain paths, *Acta Materialia* 48 (9) (2000) 2123–2133.
- [119] L. Tabourot, *Vers une vision unifiée de la plasticité cristalline. mécanique*, Ph.D. thesis, Université de Savoie (2001).
- [120] E. O. Hall, The deformation and ageing of mild steel : III discussion of results., *Proc. Phys. Soc. London B* 64 (1951) 747.
- [121] N. J. Petch, The cleavage strength of polycrystals., *J. Iron Steel Inst.* 64 (1953) 25–28.
- [122] H. Maitournam, *Matériaux et structures anélastiques*, Vol. 422, 2017.
- [123] J.-M. Pernès, Les stents traditionnels modernes : de nouveaux concepts, *Journal des Maladies Vasculaires* 40 (2) (2015) 92–93.
- [124] J. Aoki, G. Nakazawa, K. Tanabe, A. Hoye, H. Yamamoto, T. Nakayama, Y. Onuma, Y. Higashikuni, S. Otsuki, A. Yagishita, S. Yachi, H. Nakajima, K. Hara, Incidence and clinical impact of coronary stent fracture after sirolimus-eluting stent implantation, *Catheterization and Cardiovascular Interventions* 69 (3) (2007) 380–386.

-
- [125] S. Adlakha, M. Sheike, J. Wu, M. W. Burket, U. Pandya, W. Colyer, E. Eltahawy, C. J. Cooper, Stent fracture in the coronary and peripheral arteries, *Journal of Interventional Cardiology* 23 (4) (2010) 411–419.
- [126] B. Mangour, R. Mongrain, S. Yue, Coronary stents fracture : An engineering approach, *Materials Sciences and Applications* 4 (10) (2013) 606–621.
- [127] C. Bonsignore, Open stent design.
- [128] C. Bonsignore, Open stent design 20100611 3.125x scale sw2015 expanded.
- [129] Y.-G. Lee, W.-N. Zou, H.-H. Ren, Eshelby’s problem of inclusion with arbitrary shape in an isotropic elastic half-plane, *International Journal of Solids and Structures* 81 (2016) 399–410.
- [130] N. I. Muskhelishvili, Some basic problems of the mathematical theory of elasticity translated from the fourth russian edition by j. r. m. radok, *Journal of the Australian Mathematical Society*, 8.

Modèle rapide de plasticité cristal- line dans les polycristaux pour la fa- tigue à grand nombre de cycles

École doctorale N°531, Sciences, Ingénierie et Environne-
ment (SIE)

Sciences des matériaux

Thèse préparée au sein du Laboratoire Navier, UMR 8205,
Équipe Matériaux et structures architecturés

Thèse soutenue le *05/12/2023*, par
Insaf ECHERRADI

Composition du jury:

Abdelbacet OUESLATI
Professeur, Université de Lille

Rapporteur

Jean Lin DEQUIEDT
Ingénieur de recherche, CEA DAM / DIF

Rapporteur

Sylvie POMMIER
Professeure, Université Paris Saclay

Examinatrice

Michael PEIGNEY
Professeur, École des Ponts et Chaussées

Directeur de thèse

Daniel WEISZ-PATRAULT
Chargé de recherche, École polytechnique

Encadrant