

## TABLE DES MATIÈRES

	Page
INTRODUCTION .....	29
CHAPITRE 1 REVUE BIBLIOGRAPHIQUE .....	33
1.1 Alliages de titane : Application en aéronautique .....	33
1.1.1 Propriétés mécaniques des alliages de titane .....	36
1.1.2 Sensibilité des alliages de titane au chargement dwell-fatigue: problématique .....	36
1.1.2.1 Le temps du maintien en charge (le temps de dwell).....	36
1.1.2.2 Niveau de charge.....	38
1.2 Hétérogénéités microstructurales des alliages de titane.....	41
1.2.1 Influence de la morphologie et l'effet de la taille de grains sur le comportement des alliages de titane en dwell-fatigue .....	44
1.2.2 Textures cristallographiques et macrozones .....	46
1.2.3 Dispersion du comportement mécanique au sein d'une pièce d'un alliage de titane sous un chargement dwell-fatigue.....	46
1.3 Mécanisme de déformation des alliages de titane.....	48
1.3.1 Anisotropie élastique des alliages de titane .....	48
1.3.2 Systèmes de glissement dans les alliages de titane.....	49
1.3.3 Mécanisme de déformation des alliages de titane en fatigue.....	51
1.3.4 Fluage à froid des alliages de titane.....	52
1.3.5 Mécanisme de déformation des alliages de titane en dwell-fatigue .....	55
1.4 Mécanisme d'endommagement des alliages de titane en dwell-fatigue.....	55
1.4.1 Facettes observées sur la surface de rupture en dwell-fatigue.....	56
1.4.2 Mécanismes basés sur la contrainte normale maximale .....	57
1.4.3 Mécanismes basés sur la déformation plastique seule.....	58
1.4.4 Mécanismes pondérant la contrainte normale maximale et la déformation plastique maximale.....	59
1.5 Localisation de déformation : une approche basée sur la solution d'Eshelby pour une inclusion plongée dans un milieu infini.....	60
1.5.1 Inclusion homogène .....	61
1.5.1.1 Inclusion homogène ayant subi une déformation libre, plongée dans une matrice infinie non chargée.....	62
1.5.1.2 Inclusion homogène non chargée, plongée dans une matrice infinie ayant subi un chargement à infinie .....	63
1.5.2 Inclusion hétérogène .....	64
1.6 Outils de simulation numérique du comportement mécanique prenant en compte une description micromécanique.....	66
1.6.1 Méthode Auto-Cohérente.....	67
1.6.2 Méthode des Éléments Finis (ÉF).....	67
1.6.3 Méthode des automates cellulaires .....	70

CHAPITRE 2	MODÈLE DES AUTOMATES CELLULAIRES : IMPLÉMENTATION ET ÉVALUATION .....	77
2.1	Génération d'une microstructure virtuelle pour alimenter les automates cellulaires.....	77
2.1.1	Définition d'un automate cellulaire et des relations de voisinage entre cellules .....	78
2.1.2	Attribution d'une orientation cristallographique à chaque cellule.....	80
2.2	Propriétés et loi de comportement en élasticité .....	84
2.2.1	Propriétés élastiques de chaque cellule en fonction de son orientation cristalline .....	84
2.2.1.1	Module d'élasticité $E$ de chaque cellule en fonction de son orientation cristallographique .....	86
2.2.1.2	Coefficient de Poisson, module de compressibilité $k$ et de cisaillement $\mu$ .....	87
2.2.2	Rigidité globale de l'automate cellulaire : cas du comportement macroscopique isotrope en élasticité .....	88
2.2.3	Validation d'une distribution d'orientations aléatoires.....	91
2.3	Règle de transition d'échelle et localisation de la déformation .....	92
2.3.1	Règle de transition d'échelle en élasticité.....	92
2.3.2	Trois approches de localisation.....	95
2.3.3	Calcul des propriétés élastiques associées au voisinage.....	97
2.3.4	Normalisation de la déformation .....	100
2.4	Confrontation des approches proposées avec des calculs d'agrégats par des éléments finis (ÉF).....	101
2.4.1	Calculs en élasticité avec les AC .....	102
2.4.2	Calcul d'élasticité par ÉF sur des agrégats polycristallins.....	104
2.4.2.1	Génération des maillages ÉF pour les calculs d'agrégats.....	104
2.4.2.2	Calculs en élasticité anisotrope pour le titane.....	106
2.4.3	Comparaison des simulations en élasticité entre AC et ÉF .....	108
2.4.3.1	Convergence de la contrainte du grain central.....	108
2.4.3.2	Dispersion en contrainte du grain central en fonction du voisinage .....	111
2.4.3.3	Effet d'entraînement du voisinage.....	117
2.5	Conclusion .....	122
CHAPITRE 3	SIMULATIONS EN ÉLASTOPLASTICITÉ PAR AC ET ÉF.....	125
3.1	Chargement élastoplastique simulé par les AC .....	125
3.1.1	Systèmes de glissement et facteur de Schmid.....	125
3.1.2	Cissions critiques des systèmes de glissement.....	128
3.1.3	Loi de comportement élastoplastique avec un écrouissage isotrope linéaire.....	130
3.1.4	Chargement élastoplastique .....	134
3.2	Chargement élastoplastique simulé par les ÉF .....	138
3.3	Comparaison en élastoplasticité des simulations ÉF et AC.....	139
3.4	Calculs des contraintes résiduelles.....	149

3.4.1	Montée en charge élastoplastique .....	150
3.4.2	Décharge élastique .....	150
3.4.3	Comparaison des simulations ÉF et AC en charge-décharge .....	150
3.5	Conclusion .....	156
CHAPITRE 4 MODÉLISATION DU CHARGEMENT EN DWELL-FATIGUE .....		159
4.1	Décomposition du chargement en fatigue-fluage .....	160
4.1.1	Charge élastoplastique .....	160
4.1.2	Temps de maintien .....	162
4.1.2.1	Interaction entre une cellule et son voisinage lors du fluage par l'hypothèse de Kröner .....	163
4.1.2.2	Prise en compte du changement de contrainte locale par un temps fictif .....	165
4.1.3	Décharge .....	166
4.2	Modélisation du comportement viscoplastique cristallin lors du temps de maintien par deux approches .....	167
4.2.1	Approche 1 : loi de fluage macroscopique basée sur l'équation du fluage de Hollomon .....	167
4.2.1.1	Intégration de l'anisotropie lors du fluage : évolution linéaire du paramètre K en fonction de facteur de Schmid .....	169
4.2.1.2	Paramètres $a$ , $b$ et $t_{cons}$ .....	170
4.2.2	Approche 2 : loi de fluage microscopique en cisaillement plastique .....	173
4.2.2.1	Intégration de l'hétérogénéité lors du fluage : paramètre $L$ dépendant au facteur de Schmid .....	174
4.2.2.2	Paramètres $\kappa$ , $m$ et $n$ .....	176
4.2.3	Comparaison du comportement macroscopique en fluage et fatigue-fluage modélisé par les deux approches .....	177
4.3	Exploitation des possibilités du modèle AC pour la modélisation des comportements locaux en fatigue-fluage .....	181
4.3.1	Déformations inélastiques locales .....	182
4.3.2	Contraintes locales et contraintes résiduelles .....	186
4.3.2.1	Contraintes locales à la fin de la charge .....	187
4.3.2.2	Contraintes résiduelles à la fin de la décharge .....	189
4.3.3	Effet du temps de maintien sur le comportement mécanique macroscopique et local .....	192
4.3.4	Capacité du modèle AC pour la prédiction de l'endommagement local .....	194
4.3.5	Étude statistique sur une microstructure de 10000 cellules .....	207
4.4	Synthèse du chapitre .....	209
CONCLUSION .....		211
RECOMMANDATIONS .....		215

ANNEXE I	Plans et directions de glissement basal et prismatique d'une maille hexagonale dans un repère orthonormé .....	217
ANNEXE II	Analyse numérique du comportement élastoplastique .....	219
ANNEXE III	Matrice de Kearns .....	225
BIBLIOGRAPHIE .....		229

## LISTE DES TABLEAUX

		Page
Tableau 1.1	Plans et directions des systèmes de glissement d'un cristal hexagonal .....	50
Tableau 2.1	Propriétés élastiques d'un cristal HCP de titane (Fisher, 1964) .....	85
Tableau 2.2	Description des trois approches de localisation (les indices 1 et 2 du tenseur de localisation $A_{Esh}$ indiquent le numéro de l'étape de localisation).....	97
Tableau 2.3	Estimation des modules d'élasticité homogénéisés pour des agrégats isotropes pour 200 réalisations .....	107
Tableau 2.4	Comparaison de moyenne de contrainte de 900 cellules en ÉF et 1200 cellules en AC pour trois approches de localisation avec les estimations de Voigt et Reuss .....	111
Tableau 3.1	Cissions critiques des systèmes de glissement d'un cristal HCP d'un alliage Ti-6Al-4V (Bridier, 2009) .....	129
Tableau 3.2	Données cristallographiques des deux voisinages étudiés.....	140
Tableau 3.3	Orientations étudiées.....	140
Tableau 3.4	Comparaisons des moyennes des contraintes résiduelles et des écart-types entre les modèles AC et ÉF .....	153
Tableau 4.1	Valeurs maximum et minimum de $K^C$ .....	170
Tableau 4.2	Paramètre $a$ , $b$ et $t_{cons}$ fixés dans cette étude pour l'approche 1 .....	172
Tableau 4.3	Paramètre $m$ , $n$ et $\kappa$ fixés dans cette étude pour l'approche 2.....	177
Tableau 4.4	Propriétés des quatre cellules étudiées et leurs voisinages .....	196
Tableau 4.5	Contrainte et de déformation des cellules 1 et 2 dans les trois microstructures étudiées.....	204



## LISTE DES FIGURES

		Page
Figure 1-1	Influence du temps de maintien sur la durée de vie d'un alliage IMI834 en dwell-fatigue, tirée de (Bache, 1997).....	37
Figure 1-2	Accumulation de déformation plastique durant des essais de fatigue pur, 2 min de dwell-fatigue et traction uniaxiale pour un alliage Ti-6Al-2Sn-4Zr-2Mo sous un chargement appliqué de 95% de la limite d'élasticité conventionnelle, tirée de (Sinha, 2004).....	38
Figure 1-3	Influence du niveau de charge sur la durée de vie d'un alliage IMI834 en fatigue et en dwell-fatigue, tirée de (Bache, 1997).....	39
Figure 1-4	Influence du niveau de charge sur l'accumulation de la déformation plastique pour un alliage de Ti-6Al-4V en dwell-fatigue à 20°C, tirée de (Whittaker, 2009).....	40
Figure 1-5	Évolution de la contrainte cyclique moyenne à la température ambiante en fonction du nombre de cycle pour un alliage IMI834, tirée de (Singh, 2002) .....	40
Figure 1-6	Microstructure biphasé de l'alliage Ti-6Al-4V, tirée de (Bridier, 2006).....	41
Figure 1-7	Microstructure bimodale d'alliage IMI834.....	42
Figure 1-8	Présence des macrozones dans un alliage d'IMI834, tirée de (Uta, 2009) (des régions de taille millimétriques avec des orientations cristallographiques préférentielles) .....	42
Figure 1-9	Comparaison de la durée de vie de deux microstructures de l'alliage IMI834 avec (a) 15% et (b) 30% des gains alpha primaire, tirée de (Bache, 2003a).....	43
Figure 1-10	Sensibilité à l'effet dwell pour deux microstructures d'un alliage Ti-685; une microstructure avec des lamelles enchevêtrées et une microstructure avec des nodules allongés pour 2 min. de dwell à 850 MPa (ou 90% de la limite d'élasticité conventionnelle), tirée de (Bache, 2003b).....	45
Figure 1-11	Dispersion de la durée de vie aux différents endroits d'une pièce fabriquée d'un alliage IMI834, tirée de (Toubal, 2009).....	47

Figure 1-12	Calcul des modules de Young de la phase alpha pour un alliage de titane en fonction de l'angle $\theta$ entre l'axe « $c$ » du cristal et l'axe de chargement à température ambiante, tirée de (Fisher, 1964).....	49
Figure 1-13	Systèmes de glissement dans une maille hexagonale, tirée de (Balasubramanian et Anand, 2002).....	50
Figure 1-14	Diminution du taux de déformation au cours du fluage à froid pour un alliage Ti-6Al-4V, tirée et adaptée de (Brandes, 2008).....	53
Figure 1-15 a)	Facettes de rupture (propagation) observées dans un disque d'un alliage d'IMI 834, b) Projection de l'orientation des grains clivés dans un triangle standard, tirée de (Bache, 1997).....	57
Figure 1-16	Mécanisme de Stroh, tirée de (Whittaker, 2009).....	58
Figure 1-17	Une inclusion homogène ayant subi une déformation libre, plongée dans une matrice infinie non chargée.....	63
Figure 1-18	Une inclusion homogène non chargée plongée dans une matrice infinie chargée à l'infinie.....	64
Figure 1-19	Une inclusion hétérogène non chargée plongée dans une matrice infinie chargée à l'infinie.....	65
Figure 1-20	Schéma de superposition des solutions d'inclusion homogène pour résoudre le problème d'inclusion hétérogène.....	66
Figure 1-21	Un domaine d'automates cellulaires (a) hexagonal avec 6 cellules voisines immédiates (b) rectangulaire avec 8 cellules voisines immédiates.....	71
Figure 1-22	(a) Environnement de Neumann avec 4 cellules voisines (b) Environnement de Moore avec 8 cellules voisines.....	72
Figure 2-1	Exemple d'une microstructure virtuelle de 900 cellules générées par la méthode des automates cellulaires.....	79
Figure 2-2	Exemple de conditions périodiques imposées aux extrémités d'un automate cellulaire.....	80
Figure 2-3	Repère macroscopique et repère d'un cristal HCP.....	81
Figure 2-4	Trois angles d'Euler selon la convention de Bunge.....	81



Figure 2-5	Figure de pôles inverse selon $e_3^{ref}$ avec la projection stéréographique des 900 orientations d'une microstructure non texturée.....	84
Figure 2-6	Comparaison de distribution des modules d'élasticité en fonction des angles $\theta$ entre les résultats expérimentaux et d'une microstructure de 900 cellules en AC.....	87
Figure 2-7	Schéma de localisation en une étape.....	95
Figure 2-8	Localisation en deux étapes (a) étape 1: localisation de l'échelle macroscopique à l'ensemble de 7 cellules, (b) étape 2: localisation à partir de 7 cellules à la cellule centrale.....	96
Figure 2-9	Cellule 3D de Voronoï représentant un grain polyédrique (a) maillage avec 512 grains généré par le code EF Cast3M (b) pour la visualisation, chaque grain est colorié .....	105
Figure 2-10	Coupe biaisée d'un agrégat visualisant le grain central (a) et ses trois niveaux du voisinage (Priser, 2011) (b) distribution du nombre de premiers voisins pour 3000 maillages.....	106
Figure 2-11	Évolution de la moyenne des valeurs en contrainte $\sigma_{33}^C$ du grain/cellule central(e) ( $0^\circ, 0^\circ, 0^\circ$ ) en fonction du nombre de réalisations.....	109
Figure 2-12	Évolution de la moyenne des valeurs en contrainte $\sigma_{33}^C$ du grain/cellule central(e) ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) en fonction du nombre de réalisations.....	110
Figure 2-13	Comparaison de la distribution de $\sigma_{33}^C$ des cellules ( $0^\circ, 0^\circ, 0^\circ$ ) en fonction du nombre de réalisations; localisation en 1 étape .....	112
Figure 2-14	Comparaison de la distribution de $\sigma_{33}^C$ des cellules ( $0^\circ, 0^\circ, 0^\circ$ ) en fonction du nombre de réalisations; localisation en 2 étapes avec CC.....	113
Figure 2-15	Comparaison de la distribution de $\sigma_{33}^C$ des cellules ( $0^\circ, 0^\circ, 0^\circ$ ) en fonction du nombre de réalisations; localisation en 2 étapes sans CC .....	113
Figure 2-16	Comparaison de la distribution de $\sigma_{33}^C$ des cellules ( $0^\circ, 0^\circ, 0^\circ$ ) en fonction du nombre de réalisations; approche 1 en AC et les bornes de Reuss et Voigt.....	114

Figure 2-17	Comparaison de la distribution de $\sigma_{33}^C$ des cellules ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) en fonction du nombre de réalisations; approche 1 en AC et les bornes de Reuss et Voigt.....	115
Figure 2-18	Comparaison de la distribution de $\sigma_{33}^C$ des cellules ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) en fonction du nombre de réalisations; localisation en 2 étapes avec CC.....	116
Figure 2-19	Comparaison de la distribution de $\sigma_{33}^C$ des cellules ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) en fonction du nombre de réalisations; localisation en 2 étapes sans CC.....	116
Figure 2-20	Comparaison de déformation en fonction de facteur de Kearns moyen du voisinage entre les cellules ( $0^\circ, 0^\circ, 0^\circ$ ) et ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) en fonction du nombre de réalisations.....	119
Figure 2-21	Comparaison de contrainte en fonction de facteur de Kearns moyen du voisinage entre les cellules ( $0^\circ, 0^\circ, 0^\circ$ ) et ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) en fonction du nombre de réalisations.....	120
Figure 2-22	Calculs ÉF avec des facteurs de Kearns du voisinage figés pour deux orientations ( $0^\circ, 0^\circ, 0^\circ$ ) et ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ).....	121
Figure 2-23	Comparaison de contrainte en AC et ÉF pour deux orientations ( $0^\circ, 0^\circ, 0^\circ$ ) et ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) avec des voisinages figés en ÉF.....	122
Figure 3-1	Répartition des facteurs de Schmid maximaux basal et prismatique.....	128
Figure 3-2	Ajustement la cission critique prismatique avec la cission critique basale.....	129
Figure 3-3	La règle de normalité.....	133
Figure 3-4	Comportement élastoplastique macroscopique de 7 réalisations en AC et en ÉF (agrandis à droite).....	141
Figure 3-5	Comparaison de $\sigma_{33}$ de la cellule ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) en fonction de $\varepsilon_{33}^C$ pour 7 réalisations en AC et ÉF et deux voisinages.....	142
Figure 3-6	Comparaison des $\sigma_{11}$ et $\sigma_{22}$ du tenseur de contrainte en fonction de $\sigma_{33}$ pour l'orientation ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) en AC et ÉF.....	143

Figure 3-7	Comparaison des moyennes des $\sigma_{11}$ et $\sigma_{22}$ du tenseur de contrainte en fonction de $\sigma_{33}$ pour l'orientation ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) en AC et ÉF.....	144
Figure 3-8	Comparaison de $\sigma_{33}$ des deux premières orientations en fonction de $\varepsilon_{33}$ pour 7 réalisations en AC et ÉF et premier voisinage (figure agrandi à droite).....	145
Figure 3-9	Comparaison entre $\sigma_{11}$ et $\sigma_{22}$ du tenseur de contrainte en fonction de $\sigma_{33}$ pour l'orientation ( $0^\circ, 45^\circ, 30^\circ$ ) en AC et ÉF.....	146
Figure 3-10	Comparaison entre $\sigma_{22}$ du tenseur de contrainte des deux orientations ( $0^\circ, 45^\circ, 30^\circ$ ) et ( $0^\circ, 45^\circ, 0^\circ$ ) en fonction de $\sigma_{33}$ en AC et ÉF.....	147
Figure 3-11	Distribution de déformation plastique en fonction de l'angle $\theta$ pour un AC de 900 cellules .....	148
Figure 3-12	Distribution de $\sigma_{33}$ dans les cellules en fonction de l'angle $\theta$ pour un AC de 900 cellules .....	149
Figure 3-13	44 Calculs en charge-décharge macroscopique en AC sous une contrainte imposée de 977,5 MPa.....	151
Figure 3-14	Comparaison de 44 calculs en charge-décharge en AC et ÉF pour l'orientation ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) .....	152
Figure 3-15	Comparaison de 44 calculs en charge-décharge en AC et ÉF pour l'orientation ( $0^\circ, 45^\circ, 30^\circ$ ) .....	153
Figure 3-16	Comparaison de la déformation locale en charge-décharge pour l'orientation ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) en AC et ÉF .....	154
Figure 3-17	Comparaison de la déformation locale en charge-décharge pour l'orientation ( $0^\circ, 45^\circ, 30^\circ$ ) en AC et ÉF .....	155
Figure 3-18	Comparaison de la contrainte locale en charge-décharge pour l'orientation ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) en AC et ÉF .....	155
Figure 3-19	Comparaison de la contrainte locale en charge-décharge pour l'orientation ( $0^\circ, 45^\circ, 30^\circ$ ) en AC et ÉF .....	156

Figure 4-1	Actualisation de la déformation du fluage d'une cellule en fonction de sa nouvelle contrainte par le temps fictif .....	166
Figure 4-2	Constante $K^C$ en fonction du facteur de Schmid .....	169
Figure 4-3	Réduction de la vitesse du fluage à l'instant $t=0s$ par un paramètre de $t_{cons}$ .....	171
Figure 4-4	Comparaison des courbes expérimentales de Brandes (Brandes, 2008) avec celles obtenues par le modèle AC avec des paramètres $a$ , $b$ et $t_{cons}$ fixes .....	172
Figure 4-5	Comparaison de la distribution de $L^C$ et $K$ en fonction des facteurs de Schmid pour 900 cellules tirées aléatoirement dans l'espace des orientations .....	175
Figure 4-6	Comparaison des courbes expérimentales avec celles obtenues par AC avec des paramètres $\kappa$ , $m$ et $n$ .....	177
Figure 4-7	Comparaison des déformations macroscopiques du fluage et de dwell-fatigue des approches 1 et 2 .....	179
Figure 4-8	Comparaison log-log des déformations inélastiques macroscopiques du fluage et de dwell-fatigue des approches 1 et 2 .....	179
Figure 4-9	Comparaison des déformations inélastiques locales des approches 1 et 2 .....	181
Figure 4-10	Distribution de la déformation inélastique dans une microstructure de 900 cellules après (a) 1, (b) 10, (c) 1000 (d) 3000 cycles .....	183
Figure 4-11	Évolution de la déformation inélastique en fonction des angles $\theta$ pour une microstructure de 900 cellules après 1, 10, 1000 et 3000 cycles de dwell-fatigue.....	184
Figure 4-12	Dispersion des déformations inélastiques moyennes en fonction des angles $\theta$ moyens pour une microstructure de 900 cellules au 3000 <sup>ème</sup> cycle de dwell-fatigue.....	185
Figure 4-13	Triangles standards de 1, 10, 1000 et 3000 <sup>ème</sup> cycle avec la projection des cellules ayant atteint une déformation inélastique cumulée de 0,001 au cours de cyclage .....	186

Figure 4-14	Évolution des contraintes locales à la fin de la charge en fonction des angles $\theta$ pour une microstructure de 900 cellules après 1, 10, 1000 et 3000 cycles de dwell-fatigue .....	188
Figure 4-15	Évolution des contraintes locales à la fin de la charge en fonction des facteurs de Schmid pour une microstructure de 900 cellules après 1, 10, 1000 et 3000 cycles de dwell-fatigue .....	189
Figure 4-16	Évolution des contraintes résiduelles en fonction des angles $\theta$ pour une microstructure de 900 cellules après 1, 10, 1000 et 3000 cycles de dwell-fatigue.....	190
Figure 4-17	Dispersion des contraintes résiduelles moyennes en fonction des angles $\theta$ moyens pour une microstructure de 900 cellules au 3000 <sup>ème</sup> cycle de dwell-fatigue.....	191
Figure 4-18	Déformation inélastique cumulée pour différent temps de maintien dans une microstructure non texturée sous une contrainte de 855 MPa .....	193
Figure 4-19	Comparaison de la distribution de la déformation inélastique cumulée pour différent temps de maintien au 3000 <sup>ème</sup> cycle dans une microstructure non texturée sous une contrainte de 855 MPa .....	193
Figure 4-20	Localisation de déformation inélastique dans une microstructure non texturée de 900 cellules au 3000 <sup>ème</sup> cycle sous un chargement de 855 MPa de contrainte macroscopique et 30s du temps de maintien.....	195
Figure 4-21	Localisation de contrainte dans une microstructure non texturée de 900 cellules au 3000 <sup>ème</sup> cycle sous un chargement de 855 MPa de contrainte macroscopique et 30s du temps de maintien.....	198
Figure 4-21	Localisation de contrainte normale sur le plan basal des cellules dans une microstructure non texturée de 900 cellules au 3000 <sup>ème</sup> cycle sous un chargement de 855 MPa de contrainte macroscopique et 30s du temps de maintien.....	200
Figure 4-22	Évolution de (a) la déformation inélastique et (b) la contrainte au cours du chargement dans les deux cellules 3 et 4.....	201
Figure 4-23	(a) Localisation de la déformation et (b) de la contrainte dans la microstructure 2 et (c) localisation de la déformation et (d) de la contrainte dans la microstructure 3.....	203

Figure 4-24	Évolution de la contrainte de la cellule 386 au cours du chargement dwell-fatigue.....	205
Figure 4-25	Évolution de la contrainte résiduelle de la cellule 25 au cours de 3000 cycles de dwell-Fatigue .....	206
Figure 4-26	Localisation de la déformation inélastique dans une microstructure non texturée de 10000 cellules après 2500 cycles de dwell-fatigue sous une contrainte de 855 MPa et 30s du temps de maintien.....	207
Figure 4-27	Identification des cellules critiques selon un critère mixte ( $\sigma^C > 1300MPa$ et $\varepsilon^C > 0,002$ ) dans une microstructure non texturée de 10000 cellules au 2500 <sup>ème</sup> cycle de dwell-fatigue sous une contrainte de 855 MPa et 30s du temps de maintien.....	208

## LISTE DES ABRÉVIATIONS, SIGLES ET ACRONYMES

AC	Automates Cellulaires
ÉF	Éléments Finis
HCP	Hexagonal Close Packed
CRSS	Critical Resolved Shear Stress (contrainte critique résolue de cisaillement)
EBSD	Electron BackScattered Diffraction
HCF	High Cycle Fatigue
LCF	Low Cycle Fatigue
MHE	Milieu Homogène Équivalent
XRD	X-Ray Diffraction





## LISTE DES SYMBOLES ET UNITÉS DE MESURE

- : Produit scalaire des tenseurs d'ordre 2
- :: Produit des tenseurs d'ordre 4
- $\otimes$  Produit dyadique
- $\langle \rangle$  La fonction de moyenne
- $\langle x \rangle = \max(0, x)$
- [ ] Direction d'un glissement cristallin
- $\langle \rangle$  Famille de direction de glissement cristallin
- ( ) Plan d'un glissement cristallin
- { } Famille de plans de glissement cristallins



## INTRODUCTION

Depuis les années 1950, l'industrie aéronautique utilise les alliages de titane pour la fabrication de composants des turbomachines à cause de leurs propriétés mécaniques intéressantes, leur résistance à la corrosion et leur performance à des températures élevées. Cependant, lors du service, ces alliages subissent un chargement appelé « dwell-Fatigue » combiné de trois étapes; charge, maintien en charge maximale et décharge. Des études expérimentales ont montré qu'à la température ambiante, la durée de vie des alliages de titane en dwell-fatigue est bien inférieure à celle en fatigue classique. Les méthodes traditionnelles utilisées pour calculer la durée de vie en fatigue ne sont pas adaptées pour prédire la durée de vie dans de telles conditions. En effet, le comportement en dwell-fatigue d'une pièce fabriquée en alliages de titane peut être très dispersé d'un endroit à l'autre dû aux différentes hétérogénéités. Par conséquent, l'industrie aéronautique doit remplacer des pièces fabriquées en alliage de titane avant la fin de leur durée de vie réelle par mesure de précaution. C'est un processus coûteux qui suscite l'intérêt de développer des outils numériques qui permettent, dans un premier temps, de comprendre les phénomènes physiques cachés derrière cet abaissement de la durée de vie et aussi de prédire la durée de vie de ces alliages en dwell-fatigue.

Le comportement mécanique des matériaux à l'échelle macroscopique est directement influencé par le comportement de leurs microstructures. Durant le siècle dernier, beaucoup de travaux de recherches ont été effectués sur le comportement mécanique des microstructures afin de mieux comprendre l'origine physique de la déformation et de l'endommagement à cette échelle. Le comportement microstructural des matériaux réunit l'ensemble des micromécanismes de déformation, de fissuration et de rupture sous différents types de chargement. Dans les matériaux polycristallins ces mécanismes sont fortement influencés par des hétérogénéités présentes sous différentes formes et à différentes échelles. Dans les alliages de titane, à l'échelle microscopique, les hétérogénéités des structures cristallines, des orientations cristallographiques, de morphologie et de taille de grains influencent la réponse macroscopique. Cette réponse est aussi affectée, à une échelle mésoscopique, par une

hétérogénéité introduite par la présence de zones fortement texturées appelées « macrozones ». La distribution de ces macrozones dans une pièce constitue une hétérogénéité à l'échelle macroscopique qui joue aussi un rôle important dans le comportement global de ces alliages.

L'objectif général de cette recherche est de décrire le comportement global et local des alliages de titane sollicités en dwell-fatigue. Deux objectifs spécifiques sont visés : 1) Modéliser, via les automates cellulaires (AC), le comportement des microstructures de titane en élasticité et en élastoplasticité sous des chargements monotones et de ce fait, modéliser le comportement cyclique de ces microstructures en dwell-fatigue en intégrant des hétérogénéités microstructurales; 2) Identifier des cellules, qui selon des critères d'endommagement, peuvent être favorables à l'amorçage de fissures. Pour atteindre ces objectifs des outils de description réalistes de microstructures des alliages de titane sont mis en place et des modèles de simulation basés sur l'AC sont développés.

Les modèles mathématiques développés dans ce travail de recherche se basent sur la méthode des automates cellulaires. Celle-ci permet de modéliser, par des hypothèses simples, le comportement global et local des alliages de titane en élasticité, élastoplasticité et en dwell-fatigue. Le logiciel MATLAB® a été utilisé pour développer ces modèles qui permettent de décrire et d'analyser mathématiquement des microstructures virtuelles.

Cette thèse contient cinq chapitres. Le premier chapitre est une revue de littérature qui peut être divisée en trois parties. La première présente les facteurs les plus importants liés aux applications des alliages de titane et la problématique de l'abaissement de la durée de vie en dwell-fatigue. Cette partie se concentre plus particulièrement sur les microstructures et les mécanismes de déformation et d'endommagement dans des alliages de titane sous différents chargements. La deuxième partie est une présentation de la théorie d'Eshelby qui propose une solution mathématique pour estimer les champs de contraintes et de déformations dans une inclusion ellipsoïdale entourée par une matrice infinie. Différentes applications de cette théorie sont présentées. Elles permettent de localiser une charge macroscopique sur une

microstructure à l'échelle de ses grains. La solution utilisée dans cette partie constitue la base du modèle AC développé dans le cadre de cette étude. Un résumé des méthodes numériques utilisées pour modéliser le comportement micromécanique des microstructures des alliages de titane est détaillé dans la troisième partie de ce chapitre.

Le deuxième chapitre contient quatre sections et se concentre sur la description mathématique d'un modèle AC 3D en élasticité. La première partie débute par l'explication de la façon dont une microstructure non texturée est générée dans le modèle AC. Chaque grain est modélisé par une cellule. La notion de voisinage est définie et l'attribution des orientations cristallographiques des cellules est expliquée. La deuxième partie détaille les équations mathématiques utilisées dans le modèle pour définir les propriétés mécaniques et les lois de comportement des cellules en élasticité. La troisième partie de ce chapitre introduit une règle de transition d'échelle basée sur la théorie d'Eshelby permettant le passage macro-micro afin de localiser la déformation macroscopique appliquée sur la microstructure dans des cellules. Dans la partie quatre, les résultats obtenus par le modèle AC sont comparés avec les résultats d'un modèle Éléments Finis (ÉF) d'agrégats polycristallins. Cette confrontation est basée sur les moyennes et les distributions de contraintes ainsi que sur l'effet d'entraînement du voisinage. La triaxialité des champs de contraintes est également discutée.

Le chapitre trois va plus loin dans l'étude du comportement mécanique des microstructures en étudiant un chargement élastoplastique. Le modèle AC 3D développé dans ce chapitre utilise une loi d'écoulement simple en plasticité avec un écrouissage isotrope linéaire. Pour chaque cellule, on ne considère qu'un seul système de glissement (facteur de Schmid max.) et une cission critique en fonction de son facteur de Schmid. Comme pour le chapitre précédent, les résultats du modèle sont comparés aux résultats d'un agrégat polycristallin simulé par ÉF. La distribution de contraintes et de déformations locales dans des microstructures non texturées est étudiée pour trois orientations cristallographiques particulières entourées par des voisins figés. À la fin de ce chapitre, le comportement des grains en décharge est documenté afin d'étudier les contraintes résiduelles générées par la plastification locale.

Un modèle simplifié d'AC est développé dans le quatrième chapitre afin d'étudier le comportement mécanique local des microstructures de titane en dwell-fatigue. Ce modèle contient trois étapes : charge, fluage et décharge. L'étape de charge est similaire au modèle élastoplastique développé dans le chapitre précédent. La deuxième étape utilise une équation viscoplastique afin de reproduire le comportement des alliages de titane lors du temps de maintien de la charge. Deux lois du fluage sont comparées et celle la plus adaptée est choisie pour le reste de l'étude. La troisième étape modélise une décharge élastique. Différentes simulations sont effectuées afin d'étudier les déformations et les contraintes locales. Une partie de ce chapitre consiste à étudier l'effet du temps de maintien sur une microstructure non texturée. Une partie importante de ce chapitre est l'exploitation des possibilités du modèle à identifier des cellules critiques qui peuvent être favorables à l'amorçage de fissures selon des critères d'endommagement. Ce chapitre se termine avec la simulation d'une microstructure de 10000 cellules afin de montrer la capacité des AC à modéliser et traiter un grand nombre des grains sous de grand nombre de cycles avec des chargements complexes dans une courte durée.

# CHAPITRE 1

## REVUE BIBLIOGRAPHIQUE

### **Introduction :**

Ce chapitre présente une revue bibliographique du titane et de ses alliages, traitant des différents aspects liés à la fatigue et au dwell-fatigue. Les travaux portant sur les effets du chargement et de la microstructure sur le comportement des alliages de titane sont introduits au début de cette revue. Ensuite, un rappel sur les hétérogénéités microstructurales, les mécanismes de déformation et les micromécanismes d'endommagement des alliages de titane est fourni. Par la suite, les méthodes de calcul et de simulation numérique sont présentées et critiquées.

La théorie d'Eshelby est également détaillée par la suite afin de présenter cette méthode mathématique pour le passage d'une échelle macroscopique à une échelle microscopique. Finalement, les travaux numériques sur le comportement des alliages de titane en dwell-fatigue sont étudiés et critiqués.

### **1.1 Alliages de titane : Application en aéronautique**

Depuis les années 1950, les alliages de titane sont largement utilisés dans le domaine aéronautique notamment pour des composants de turbomachines (compresseur, etc.) à des niveaux de température allant de la température ambiante jusqu'à 600°C. Ce sont de bons candidats pour des applications aéronautiques puisqu'ils possèdent des bonnes propriétés métallurgiques (Boyer, 1996) :

- Masse volumique : la masse est un facteur très important pour l'industrie aéronautique. La masse volumique du titane ( $\sim 4500 \text{ kg/m}^3$ ) avec des résistances mécaniques comparables à celles de l'acier ( $\sim 8000 \text{ kg/m}^3$ ), permet de remplacer

l'acier par ces alliages dans cette industrie. Cela permet une économie significative dans le poids des structures aéronautiques.

- Température d'opération : la température d'opération pour les alliages de titane peut s'élever jusqu'à 600°C. Cette propriété du titane permet de remplacer l'aluminium pour des températures supérieures à 130°C et remplacer l'acier dans les composants des compresseurs.
- Résistance à la corrosion : en comparaison avec l'aluminium ou l'acier, ces alliages ont une très bonne résistance à la corrosion. Une des causes de sa résistance à la corrosion est le développement d'une couche protectrice constituée d'oxyde  $TiO_2$ .
- Compatibilité avec des composites : avec l'utilisation croissante des composites dans l'industrie aérospatiale, les alliages de titane se distinguent comme un métal très intéressant grâce à ses compatibilités avec les fibres de carbone. Dans ces composites, généralement, les fibres de carbone sont utilisées comme la peau et le titane constitue le cœur de la structure.

Le titane pur existe sous deux formes cristallographiques dépendantes de la température. À la température ambiante, il possède une structure cristallographique hexagonale compacte (HPC) appelée « phase alpha ( $\alpha$ ) ». À la température de 882 °C la structure cristallographique du titane pur se transforme en une structure cubique centrée (CC) appelée « phase bêta ( $\beta$ ) ». Cette température de transformation appelée « température de transus » dépend fortement des éléments d'alliage du titane et change pour chaque alliage. La phase bêta reste stable jusqu'à la température de fusion 1672°C (Davies, 1997).

D'un point de vue morphologique, la phase alpha peut être présente sous deux formes dans un alliage de titane; 1) alpha primaire : qui consiste en des nodules de la phase alpha et 2) alpha secondaire : où cette dernière est caractérisée par des colonies de lamelles de phase alpha dans une base de phase bêta.



À la température ambiante, les alliages de titane peuvent être divisés en trois catégories dépendant de leurs phases cristallographiques (Boyer, 1996);

Alliages  $\alpha$  et proche  $\alpha$  :

À la température ambiante, ces alliages ont une structure cristalline HCP avec moins de 10% de phase bêta (Polmear, 1995). Cette catégorie contient deux types d'alliages, le titane pur et des alliages contenant des éléments  $\alpha$ -gènes comme O, N, C, Al, etc. Ces éléments augmentent la température de transus et stabilisent la phase alpha à la température ambiante. Les alliages Ti-3Al-2.5V, Ti-5Al-2.5Sn, et IMI834 se classent dans cette catégorie.

Alliages  $\alpha$ - $\beta$  :

Dans ces alliages, la présence des éléments  $\alpha$ -gènes et  $\beta$ -gènes (ex. V, Fe, Mo) permet l'existence des deux phases alpha et bêta à la température ambiante. Ces alliages peuvent contenir une fraction volumique de la phase bêta entre 4 à 40% (Leyens, 2003). L'alliage le plus connu dans cette catégorie est le Ti-6Al-4V. Il est l'alliage de titane le plus utilisé en aéronautique. Il est utilisé dans le fuselage, les nacelles, l'engrenage d'atterrissage et voire les ailes (Boyer, 1996).

Alliages  $\beta$  :

Cette catégorie qui contient des alliages  $\beta$  et proche  $\beta$  est caractérisée par la forte présence des éléments  $\beta$ -gènes. Ces éléments, comme le V et Mo, diminuent la température de transus et rendent l'alliage relativement stable à la température ambiante. La fraction volumique de la phase bêta est égale à 100% pour les alliages  $\beta$  et entre 85 à 90% pour les alliages proche  $\beta$  (Leyens, 2003). L'alliage Ti-10V-2Fe-3Al est un des alliages les plus connus dans cette catégorie pour des applications aéronautiques.

### **1.1.1 Propriétés mécaniques des alliages de titane**

Les alliages de titane présentent de bonnes propriétés mécaniques en fatigue et en fluage (limite d'élasticité conventionnelle  $\approx 950$  MPa avec un module de Young  $\approx 116$  GPa). Différentes catégories de ces alliages ont été développées pour subir différents types de chargement dans des environnements divers. Les alliages de titane  $\alpha$ - $\beta$  et proche  $\alpha$  comme Ti-6-2-4-2, Ti-6Al-4V et IMI 834, sont les alliages de titane le plus utilisés dans l'aéronautique pour leur fiabilité d'opération en températures élevées. Ils possèdent une bonne résistance en fatigue et en fluage à chaud.

Les propriétés mécaniques de ces alliages dépendent fortement de leurs microstructures. La morphologie, la taille de grains, la fraction volumique de la phase alpha, etc. sont des paramètres très importantes définissant les propriétés mécaniques de chaque alliage.

### **1.1.2 Sensibilité des alliages de titane au chargement dwell-fatigue: problématique**

Chaque cycle du dwell-fatigue consiste à en trois étapes : charge, maintien en charge maximale (fluage) et décharge. L'introduction d'une période de fluage à chaque cycle du chargement en fatigue classique cause l'abaissement en durée de vie des alliages de titane à la température ambiante (l'effet dwell). Il a été observé que l'effet dwell est sensible aux conditions de chargement (Bache, 2003a; Doquet, 2012; Evans, 1994; Miller, 1987). Ces conditions réunissent l'ensemble des effets du temps de maintien, du niveau de charge, du type de chargement appliqué (déformation/contrainte imposée), de la vitesse de chargement, etc. Dans cette section est reportée l'influence de deux facteurs qui semblent prépondérants, le temps de maintien et le niveau de charge.

#### **1.1.2.1 Le temps du maintien en charge (le temps de dwell)**

Le temps du maintien favorise l'accumulation de la déformation plastique dans certaines zones de la microstructure du matériau. En d'autres termes, sous un chargement de dwell-

fatigue, le niveau de déformation accumulée croît avec l'augmentation du temps de maintien (Whittaker, 2009) (Figure 1-1).

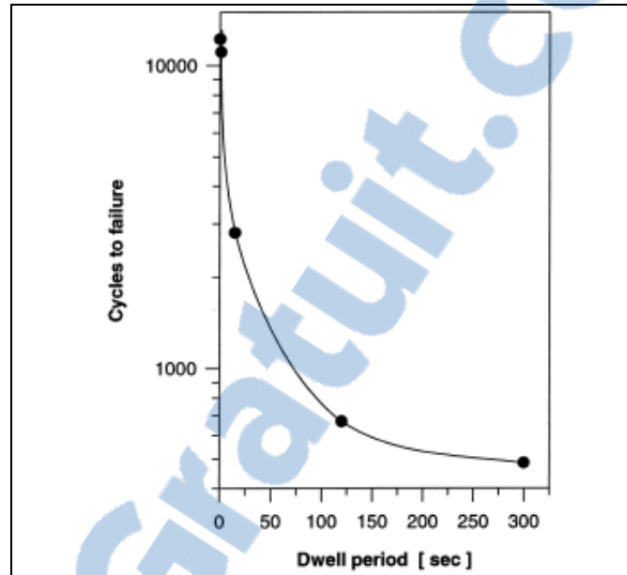


Figure 1-1 Influence du temps de maintien sur la durée de vie d'un alliage IMI834 en dwell-fatigue, tirée de (Bache, 1997)

La Figure 1-2 illustre qu'au cours de dwell-fatigue, plus de déformation plastique s'accumule par rapport à d'autres types de chargement tels que la fatigue pure ou la traction simple. Pour savoir comment l'introduction du fluage conduit à une plus forte accumulation de déformation et pour pouvoir prédire comment il agit, il faut connaître les mécanismes de déformation élastoviscoplastique à l'échelle de la microstructure au cours de chaque cycle charge-maintien-décharge. Cela constitue une étape importante de la présente étude.

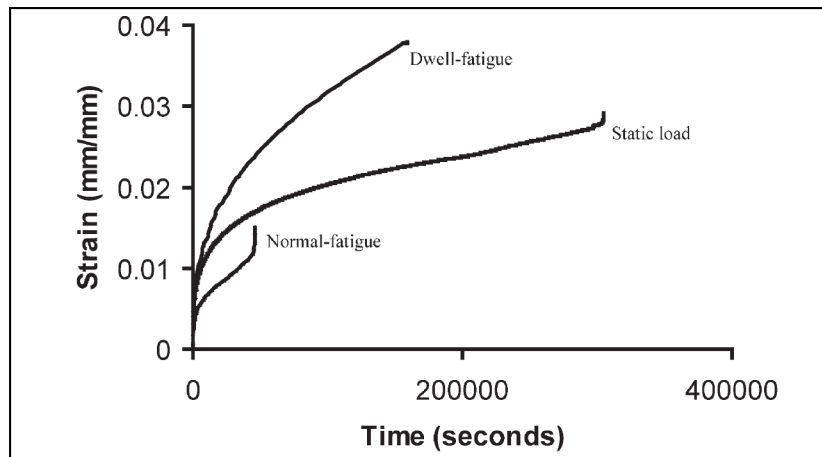


Figure 1-2 Accumulation de déformation plastique durant des essais de fatigue pur, 2 min de dwell-fatigue et traction uniaxiale pour un alliage Ti-6Al-2Sn-4Zr-2Mo sous un chargement appliqué de 95% de la limite d'élasticité conventionnelle, tirée de (Sinha, 2004)

### 1.1.2.2 Niveau de charge

En se basant sur le fait que la diminution de la durée de vie est due à l'introduction de l'étape de fluage en dwell-fatigue, il est important de connaître à quels niveaux de charge se produit le fluage dans les alliages de titane sensibles au dwell et comment cet effet dwell évolue avec le niveau de charge appliquée.

Le fluage à froid (température ambiante) dans les alliages de titane, se manifeste à des niveaux de chargement bas qui peuvent descendre jusqu'à 60% de la limite d'élasticité conventionnelle (Savage, 2000). Il a été démontré qu'avec l'augmentation du niveau de charge, la durée de vie des alliages de titane diminue fortement lorsqu'un maintien de la charge est appliqué (Figure 1-3). La Figure 1-3 illustre l'évolution de la durée de vie d'un alliage d'IMI834 en fatigue pure et en dwell-fatigue pour différents niveau de charge. On constate qu'en dwell-fatigue, la durée de vie diminue fortement par l'augmentation du niveau de charge. Cet abaissement de la durée de vie est accompagné d'une déformation plastique élevée. En effet, chaque niveau de charge peut activer certains systèmes de glissement à l'échelle des grains et l'activation de ces systèmes introduit de la déformation plastique

locale. Ainsi, si la charge appliquée augmente, plus de déformation plastique s'accumule au cours du chargement (à cause de l'activation des nouveaux systèmes de glissement ou la déformation supplémentaire introduite par des systèmes déjà activés) (Figure 1-4). Il faut noter que le glissement cristallin n'est pas le seul mécanisme qui provoque le fluage, mais le fluage se produit également par des mouvements intergranulaires d'atomes.

Le type de chargement imposé (déformation imposée ou contrainte imposée) joue aussi un rôle important dans le comportement du matériau (Dunne et Rugg, 2008). L'alliage de titane présente un adoucissement marqué au cours la durée de vie (Singh, 2002). La Figure 1-5 montre l'adoucissement de ces alliages sous un chargement cyclique de déformation contrôlée. Dans notre étude, l'influence de type de chargement n'est pas étudiée.

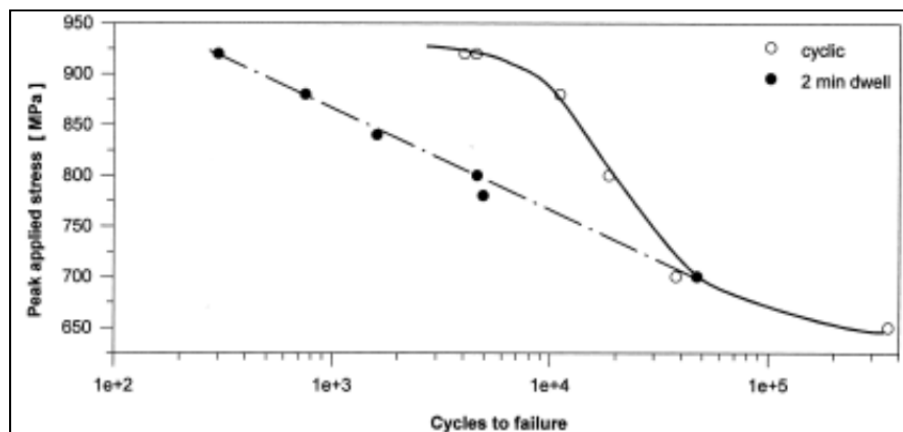


Figure 1-3 Influence du niveau de charge sur la durée de vie d'un alliage IMI834 en fatigue et en dwell-fatigue, tirée de (Bache, 1997)

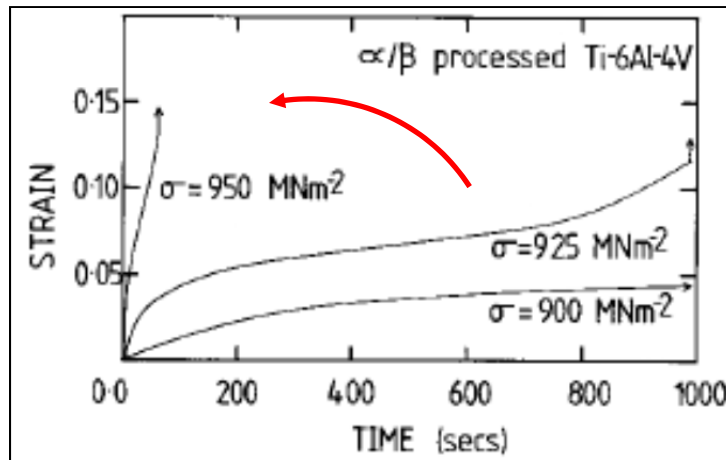


Figure 1-4 Influence du niveau de charge sur l'accumulation de la déformation plastique pour un alliage de Ti-6Al-4V en dwell-fatigue à 20°C, tirée de (Whittaker, 2009)

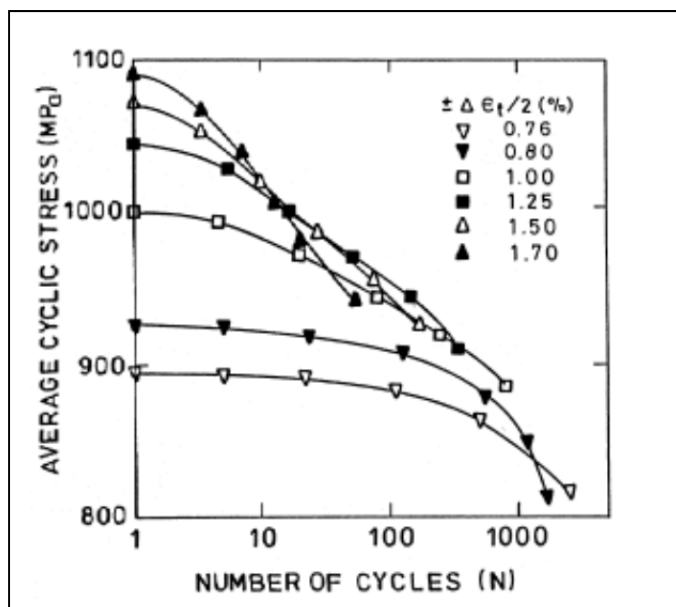


Figure 1-5 Évolution de la contrainte cyclique moyenne à la température ambiante en fonction du nombre de cycle pour un alliage IMI834, tirée de (Singh, 2002)

Il existe d'autres facteurs concernant le chargement comme la vitesse de chargement ou le rapport  $r = \frac{\sigma_{\min}}{\sigma_{\max}}$ , etc. qui ne font pas à priori parti de notre étude.

## 1.2 Hétérogénéités microstructurales des alliages de titane

Au sein d'une pièce forgée des hétérogénéités sont présentes à différentes échelles (microscopique, mésoscopique et macroscopique) et sont de différentes natures (cristallographie, morphologie, phase, comportement).

Les alliages de titane utilisés en aéronautique ont classiquement des microstructures bimodales caractérisées par des nodules de phase alpha séparés par des colonies de lamelles  $\alpha+\beta$ . Ces microstructures contiennent les deux phases cristallines alpha et bêta (Figure 1-6). La Figure 1-7 montre l'image optique d'une microstructure biphasée d'un alliage de titane IMI834. Les nodules alpha, aussi appelés alpha primaire présentent généralement une forme équiaxe, mais peuvent avoir également une forme allongée due au procédé de mise en forme. Les colonies des lamelles, aussi appelées alpha secondaire, peuvent être de deux types : colonie de lamelles parallèles et colonie de lamelles enchevêtrées. Le pourcentage de nodules alpha primaire et de colonies de lamelles dans une microstructure peut varier en fonction du traitement thermique appliqué au matériau.

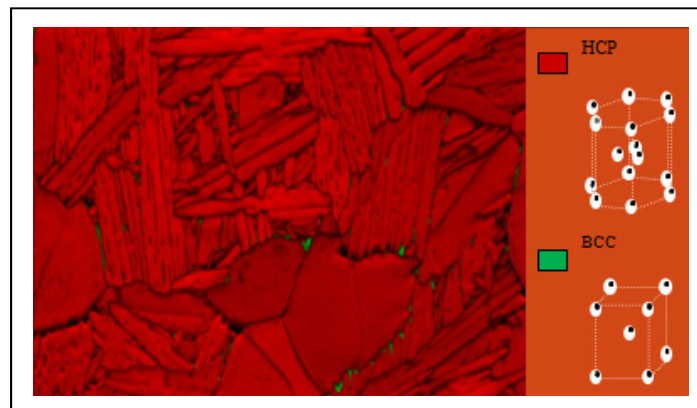


Figure 1-6 Microstructure biphasée de l'alliage Ti-6Al-4V, tirée de (Bridier, 2006)

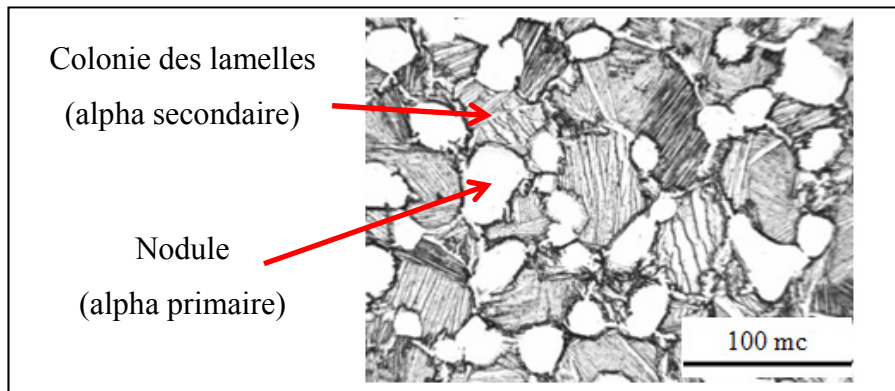


Figure 1-7 Microstructure bimodale d'alliage IMI834

La présence de textures cristallographiques appelées « macrozones » a été notée dans les pièces forgées des alliages de titane. Une macrozone est une région de taille millimétrique avec des orientations cristallographiques préférentielles (texture) très marquées (Uta, 2009). Ces textures constituent une hétérogénéité à l'échelle mésoscopique (Figure 1-8). Les différences de morphologie, d'intensité et de distribution spatiale de ces macrozones introduisent une hétérogénéité à l'échelle de la pièce (hétérogénéité macroscopique).

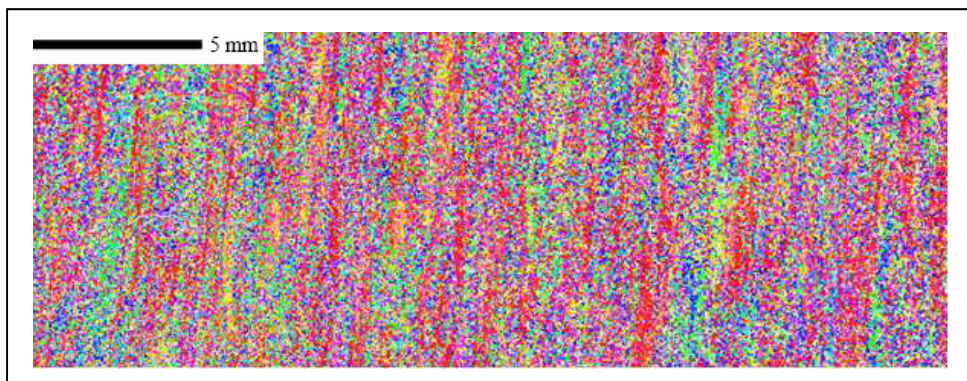


Figure 1-8 Présence des macrozones dans un alliage d'IMI834, tirée de (Uta, 2009) (des régions de taille millimétriques avec des orientations cristallographiques préférentielles)

De nombreuses études ont confirmé que les alliages de titane sont sensibles au dwell-fatigue à basse température quelque soit leur microstructure (Bache, 2003a; Sinha, 2004; Whittaker, 2009). Le niveau de sensibilité au dwell-fatigue dépend cependant de la taille de grains, du pourcentage de grains alpha primaire, de la morphologie (lamelle ou equiaxe), de la texture et



des macrozones. Ces aspects ne sont pas indépendants les uns des autres et le changement d'un facteur peut influencer le comportement des autres facteurs. Il apparaît nécessaire d'intégrer l'ensemble des hétérogénéités microstructurales pour rendre compte de leur influence combinée sur le comportement en dwell-fatigue.

La Figure 1-9 présente les courbes de fatigue et de dwell-fatigue d'un alliage IMI834 d'une part pour une pièce forgée de type disque et d'autre part pour une pièce laminée de type barre. Ces pièces présentent localement des différences de morphologie et de pourcentage de nodules. La sensibilité à l'effet dwell est plus importante pour le disque où les nodules ont une forme allongée et où la fraction des nodules est plus élevée (Bache, 2003a).

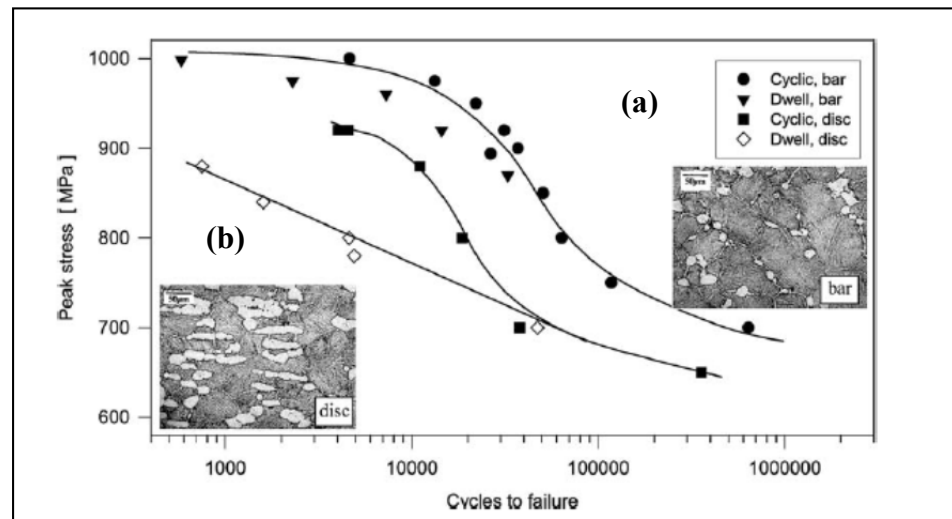


Figure 1-9 Comparaison de la durée de vie de deux microstructures de l'alliage IMI834 avec (a) 15% et (b) 30% des gains alpha primaire, tirée de (Bache, 2003a)

Ci-dessous sont détaillés les travaux issus de la littérature faisant ressortir l'influence spécifique de chaque caractéristique microstructurale.

### **1.2.1 Influence de la morphologie et l'effet de la taille de grains sur le comportement des alliages de titane en dwell-fatigue**

Le comportement des différentes microstructures en fonction de la morphologie et l'effet de la taille a été étudié par certains auteurs (Bache, 2003b; Eunha, 2004; Whittaker, 2009). Dans cette section, on présente la sensibilité de différentes microstructures à l'effet dwell, du moins sensible au plus sensible.

Microstructures avec des lamelles enchevêtrées (*basketweave*) :

Ce type de microstructure, obtenue grâce à des vitesses de refroidissement rapide, présente une très faible sensibilité à l'introduction d'un temps de maintien en charge dans le chargement cyclique (Miller, 1987; Savage, 2000). Cela peut être expliqué par le fait que dans ces microstructures, les dislocations doivent traverser des lamelles et des interfaces de matrice bêta avec des orientations cristallographiques différentes pour autoriser une grande longueur d'écoulement des dislocations et donc une déformation plastique importante. Les systèmes de glissement activés doivent changer d'une lamelle à l'autre. Cette complexité du mouvement de dislocations résulte en une faible propension à la déformation plastique dans l'alliage. Ainsi, ces microstructures sont plus résistantes à l'accumulation de déformation et de là, à l'effet dwell. La Figure 1-10 montre la durée de vie pour deux microstructures de l'alliage Ti-685. On voit que la durée de vie de la microstructure avec des grains alpha primaire allongés est presque 4 fois inférieure à celle avec des lamelles enchevêtrées pour le même niveau de charge.

Microstructures avec des lamelles parallèles :

Ces microstructures sont caractérisées par des colonies des lamelles parallèles. Ces microstructures sont plus sensibles à l'effet dwell par rapport aux microstructures avec des lamelles enchevêtrées (Davies, 1997). Le mouvement des dislocations dans ces

microstructures est plus facile que dans les microstructures avec des lamelles enchevêtrées, car généralement les orientations des lamelles dans une colonie sont proches.

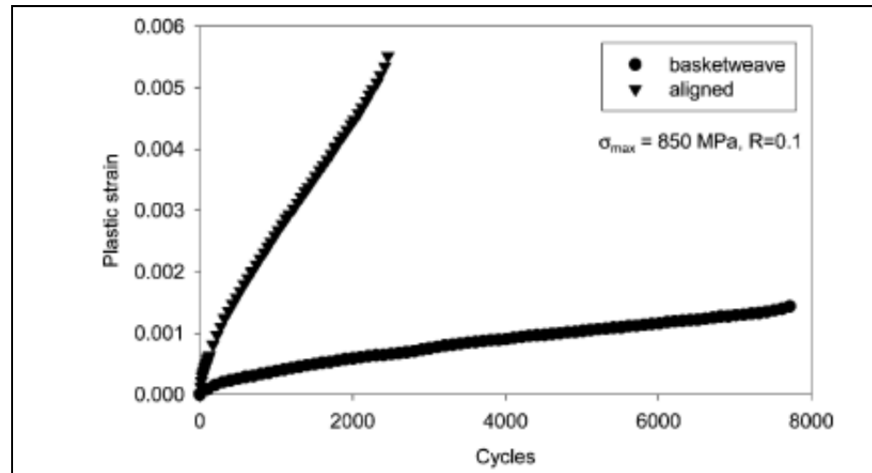


Figure 1-10 Sensibilité à l'effet dwell pour deux microstructures d'un alliage Ti-685; une microstructure avec des lamelles enchevêtrées et une microstructure avec des nodules allongés pour 2 min. de dwell à 850 MPa (ou 90% de la limite d'élasticité conventionnelle), tirée de (Bache, 2003b)

Microstructures bimodales :

Elles contiennent deux morphologies de grains, par exemple, nodules et colonies de lamelles. Ces microstructures sont plus sensibles à l'effet dwell par rapport aux deux microstructures précédentes. Cette sensibilité est influencée par le pourcentage des deux morphologies. En général, la durée de vie des microstructures contenant plus de grains alpha primaire est moindre sous chargement de dwell-fatigue (Bache, 2003b; Davies, 1997). Cet effet est expliqué par ces auteurs par l'effet de la taille et de la morphologie des grains : les nodules permettent d'accumuler plus de dislocations sur leurs joints de grains à cause leur grande taille par rapport aux lamelles. Cet aspect est associé à la diminution de la durée de vie des alliages.

Microstructures équiaxes :

Ces microstructures sont les plus sensibles à l'effet de dwell à cause de la présence unique de nodules (Shen, 2004). Les arguments donnés pour les microstructures bimodales sont valables aussi pour ces microstructures.

### **1.2.2 Textures cristallographiques et macrozones**

Les procédés de mise en forme introduisent différents types d'hétérogénéités de microstructure et de texture dans les alliages de titane. Plusieurs travaux ont mis en évidence la présence de macrozones dans des pièces forgées en IMI834 ou Ti-64 (Bridier, 2006; Germain *et al.*, 2005; Germain *et al.*, 2008). Germain *et al.* montrent que, dans un alliage IMI834 avec une microstructure bimodale, les macrozones sont caractérisées par des grains alpha primaire avec la même texture que la majorité des colonies de lamelles.

L'hétérogénéité des propriétés mécaniques due à la présence de macrozones cause des localisations de déformation fortes dans des zones favorablement orientées de pièces forgées. En raison de leur effet sur la durée de vie des pièces, ces hétérogénéités de texture et de microstructure doivent être évitées ou du moins, leur présence doit être détectée le plus précisément possible et leurs caractéristiques étudiées. Les attaques macrographiques, l'EBSD et la diffraction de rayons X (XRD) sont les techniques les plus utilisées pour détecter les macrozones.

### **1.2.3 Dispersion du comportement mécanique au sein d'une pièce d'un alliage de titane sous un chargement dwell-fatigue**

En raison de l'hétérogénéité de texture au sein d'une pièce, le comportement cyclique et la durée de vie peuvent être dispersés. Toubal *et al.* (Toubal, 2009) ont étudié la dispersion de durée de vie de l'alliage IMI834 en dwell-fatigue sous un niveau de charge de 824 MPa (90% de la limite d'élasticité conventionnelle) et avec un temps de dwell de 30 secondes. Ils ont

utilisé dix échantillons qui ont été prélevés à différents endroits d'une pièce forgée de type disque. Ils ont observé une dispersion d'accumulation de déformation et de durée de vie d'un facteur 5 dans les échantillons (Figure 1-11).

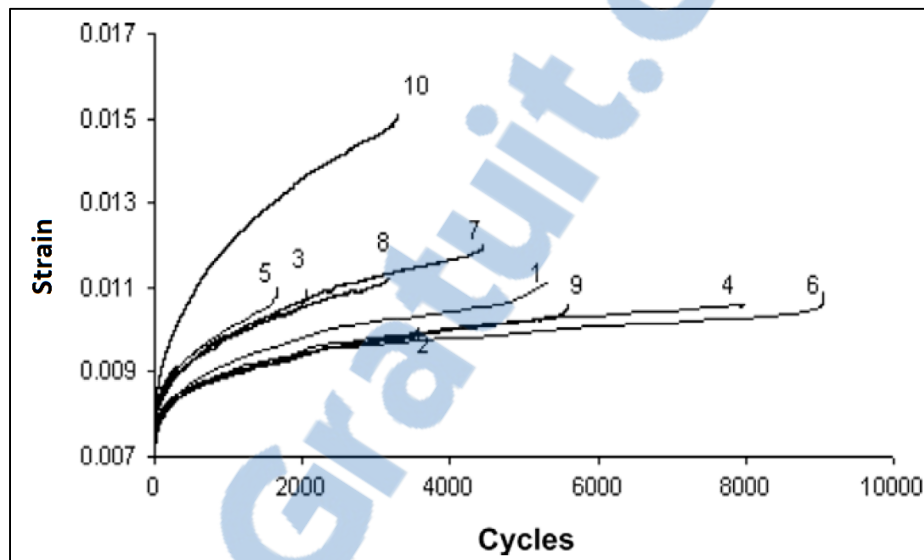


Figure 1-11 Dispersion de la durée de vie aux différents endroits d'une pièce fabriquée d'un alliage IMI834, tirée de (Toubal, 2009)

Cette expérience montre que le comportement du matériau en dwell-fatigue, ne varie pas seulement d'une microstructure à l'autre, mais aussi peut varier pour des échantillons ayant a priori la même microstructure. La présence des zones texturées (macrozones) peut expliquer cette variation de comportement d'un échantillon à l'autre. Pour mieux comprendre ce comportement, savoir quelles zones locales subissent plus de déformation et quelles textures celles-ci présentent est essentiel. Comprendre ce comportement nécessite une approche statistique qui permettrait de vérifier les zones locales du matériau les plus affectées par la déformation plastique en considérant les différents niveaux d'hétérogénéités.

### **1.3 Mécanisme de déformation des alliages de titane**

Tous les mécanismes provoquant l'abaissement de la durée de vie des alliages de titane en dwell-fatigue ne sont pas connus. Mais, des recherches récentes ont identifié certains mécanismes qui semblent avoir des influences significatives sur l'abaissement de la durée de vie en dwell-fatigue. Dans cette section, ces mécanismes de déformation des alliages de titane en fatigue, fluage et en fatigue-fluage sont présentés.

#### **1.3.1 Anisotropie élastique des alliages de titane**

Un matériau ayant un comportement macroscopique élastique isotrope peut avoir des comportements élastiques anisotropes à l'échelle de sa microstructure. Cela dépend fortement de l'orientation cristallographique des grains. À la température ambiante, la phase alpha (HCP) des alliages de titane possède un comportement anisotrope à l'échelle locale. En élasticité, ce comportement anisotrope peut être exprimé par le module de Young. Ce module est typiquement calculé en fonction de l'angle entre l'axe [0001] de la maille hexagonale et la direction du chargement. Plusieurs chercheurs ont calculé la variation de modules de Young dans les alliages de titane en fonction de cet angle appelé «  $\theta$  » (Olsen, 1971; Tromans, 2011; Zakharchenko, 1968). La rigidité élastique est maximum quand l'axe [0001] est parallèle à la direction du chargement ( $\theta = 0^\circ$ ) et elle est minimale quand l'axe [0001] est perpendiculaire à l'axe du chargement ( $\theta = 90^\circ$ ). La Figure 1-12 montre la variation du module de Young en fonction de l'angle  $\theta$  pour la phase alpha d'une microstructure d'un alliage de titane Ti-6Al-4V.

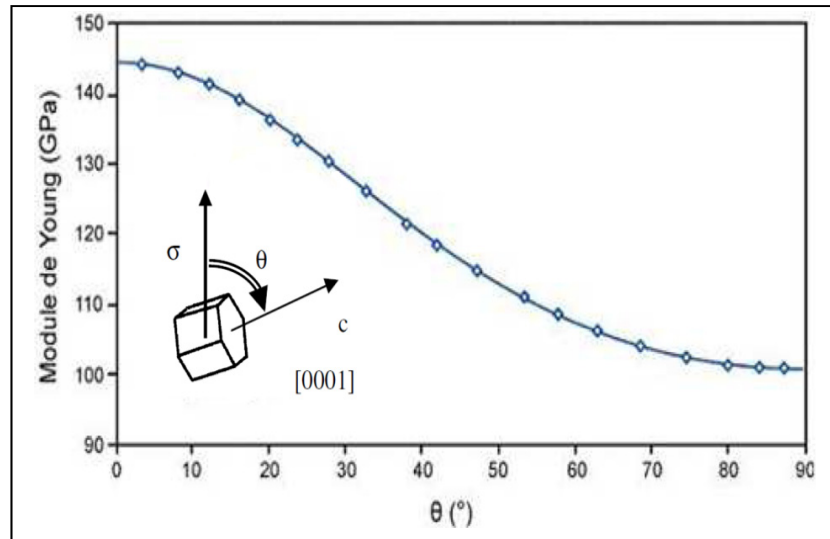


Figure 1-12 Calcul des modules de Young de la phase alpha pour un alliage de titane en fonction de l'angle  $\theta$  entre l'axe « c » du cristal et l'axe de chargement à température ambiante, tirée de (Fisher, 1964)

On observe que le module de Young change environ de 144 GPa pour une  $\theta = 0^\circ$  à 100 GPa pour  $\theta = 90^\circ$ .

### 1.3.2 Systèmes de glissement dans les alliages de titane

Les alliages de titane considérés dans cette étude sont des alliages de type proche alpha dont la phase bêta constitue une faible fraction volumique de leurs microstructures. Par conséquent, seule la phase alpha ayant une structure cristalline HCP est étudiée dans ce travail. Un plan et une direction dans une structure cristalline constitue un système de glissement. L'activation des systèmes de glissement introduit la plasticité dans une microstructure. La déformation plastique dans les alliages de titane proche alpha dépend fortement de l'orientation cristallographique des grains à cause de la faible symétrie de la maille hexagonale HCP. La Figure 1-13 et le Tableau 1.1 montrent les systèmes de glissement d'une maille hexagonale. Chaque système de glissement résiste différemment à la déformation. Cela conduit à un comportement plastique fortement anisotrope à l'échelle des grains (Balasubramanian, 2002).

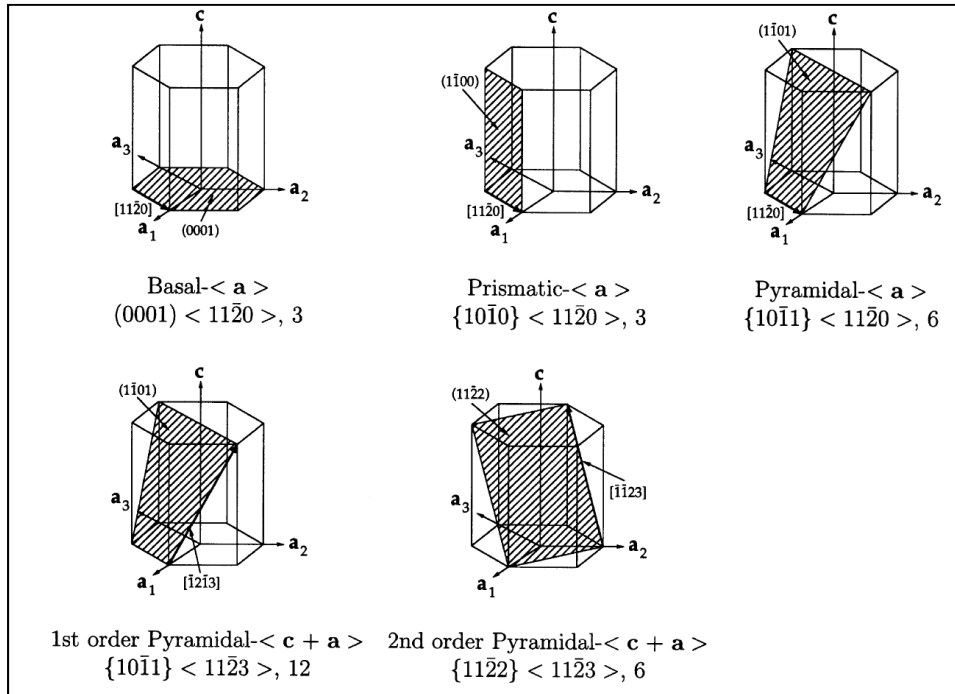


Figure 1-13 Systèmes de glissement dans une maille hexagonale, tirée de (Balasubramanian et Anand, 2002)

Tableau 1.1 Plans et directions des systèmes de glissement d'un cristal hexagonal

Système de glissement $s$	Normale de plan $\vec{n}$	Direction $\vec{l}$	N. de systèmes
Basal	$(0001)$	$\langle a \rangle = \frac{1}{3} \langle 11\bar{2}0 \rangle$	3
Prismatique	$\{10\bar{1}0\}$	$\langle a \rangle = \frac{1}{3} \langle 11\bar{2}0 \rangle$	3
Pyramidaux	$\{10\bar{1}1\}$	$\langle a \rangle = \frac{1}{3} \langle 11\bar{2}0 \rangle$	6
Pyramidaux	$\{10\bar{1}1\}$	$\langle c+a \rangle = \frac{1}{3} \langle 11\bar{2}3 \rangle$	12
Pyramidaux	$\{11\bar{2}2\}$	$\langle c+a \rangle = \frac{1}{3} \langle 11\bar{2}3 \rangle$	6

Typiquement, des grains avec l'axe  $[0001]$  orienté perpendiculairement à l'axe de chargement se déforment facilement car les plans denses (dans ce cas les plans prismatiques



$\{10\bar{1}0\}$ ) sont favorablement orientés. D'autre part, des grains avec l'axe  $[0001]$  parallèle à l'axe de chargement sont normalement difficile à déformer car la cission critique des systèmes  $\langle c+a \rangle$  est plus élevée que la cission critique des systèmes de glissement de type  $\langle a \rangle$ .

Pour étudier le comportement des alliages de titane en dwell-fatigue, un résumé sur les mécanismes de déformation des alliages de titane en fatigue, fluage à froid et dwell-fatigue est présenté par la suite.

### 1.3.3 Mécanisme de déformation des alliages de titane en fatigue

Plusieurs recherches ont montré que le mécanisme principal qui contrôle la déformation plastique dans les alliages de titane subissant des chargements quasi-statiques à la température ambiante est le déplacement des dislocations vis sur les plans prismatiques ( $\langle a \rangle$  sur  $\{10\bar{1}0\}$ ) (Naka, 1988). Le deuxième système de glissement le plus activé selon la littérature est le système basal ( $\langle a \rangle$  sur  $(0001)$ ). La cission critique des systèmes de glissement de type  $\langle c+a \rangle$  est supérieure à celle des systèmes de type  $\langle a \rangle$ , donc, la déformation plastique sur ces plans est quasiment impossible à la température ambiante.

Le travail de Baxter (Baxter, 1996) sur un alliage d'IMI834 en fatigue sous un niveau de contrainte autour de 95-100% de la limite d'élasticité conventionnelle montre aussi l'activation des systèmes de glissement prismatiques dans des grains favorablement orientés qui conduit à des bandes de glissement. Feaugas (Feaugas, 1997a; 1997b) a étudié le comportement cyclique d'un alliage de titane de Ti-6246 sous différents chargements et différentes températures. Il a observé que les systèmes de glissement prismatiques sont les systèmes communs à s'activer dans les grains alpha primaire quelque soit la température. Tan *et al.* (Tan *et al.*, 1998a; Tan *et al.*, 1998b) ont étudié le comportement d'un cristal alpha de titane pur sous un chargement fatigue oligocyclique afin de tracer leur courbe de contrainte-déformation. Leurs travaux montrent la forte dépendance de la déformation plastique à

l'orientation cristallographique. Selon Tan, les systèmes de glissement prismatiques sont les systèmes de déformation préférentiels et ils peuvent s'activer même avec un facteur de Schmid modéré. Les systèmes de glissement pyramidaux de premier ordre et basaux sont les suivants à s'activer. Bridier (Bridier, 2009) a effectué une recherche sur l'activation des systèmes de glissement d'un alliage de titane Ti-6Al-4V en fatigue de grande nombre de cycles (HCF pour *high cycle fatigue*). Il a observé que les systèmes de glissement activés durant ce chargement sont principalement les systèmes basaux et prismatiques. L'activation de ces deux systèmes de glissement est expliquée par leur faible valeur de cission critique. Par ailleurs, les grains activant l'un ou l'autre des systèmes sont ceux qui sont favorablement orientés pour chaque type de glissement (facteur de Schmid élevé). Ainsi, Bridier *et al.* ont observé que certains grains se déforment plastiquement très tôt au cours du cyclage et multiplient ensuite le nombre de bandes de glissement. Au contraire, certains grains ne présentaient aucune trace de glissement plastique tout au long du chargement. Le faible nombre de systèmes de glissement effectivement activés et la faible symétrie de la maille hexagonale compacte induit une forte anisotropie de comportement plastique.

#### **1.3.4 Fluage à froid des alliages de titane**

On s'intéresse au fluage afin de connaître l'origine de la déformation locale lors d'un chargement dwell-fatigue. Un chargement de fluage consiste en trois étapes; 1) fluage primaire pendant lequel la vitesse de déformation diminue progressivement, 2) fluage secondaire pendant lequel la vitesse de déformation est constante 3) fluage tertiaire pendant lequel la vitesse de déformation croît jusqu'à la rupture.

Il a été observé que le fluage à froid dans les alliages de titane est un fluage primaire, car le taux de déformation diminue au cours de fluage (Brandes, 2008). En effet, lors d'un chargement de fluage à froid, les grains favorablement orientés se déforment suivant le niveau de chargement et ils causent un taux de déformation initial plus ou moins élevé au départ. Au cours du fluage, les grains deviennent plus difficiles à déformer à cause de l'écrouissage, ce qui conduit à la diminution de la vitesse de déformation. La Figure 1-14

présente la déformation plastique cumulée en fonction du temps pour une microstructure d'un alliage Ti-6Al-4V en fluage à froid et sous deux niveaux de chargement (l'auteur ne précise pas le type de cette microstructure et ni sa limite d'élasticité conventionnelle). On observe que le taux de déformation diminue au cours du temps (fluage primaire) pour les deux niveaux de chargement. Ainsi, le niveau de déformation accumulée est plus important sous une charge plus élevée. Mieux identifier les micromécanismes de déformation lors du fluage primaire peut nous aider à développer des modèles réalistes qui prédisent le comportement de ces alliages.

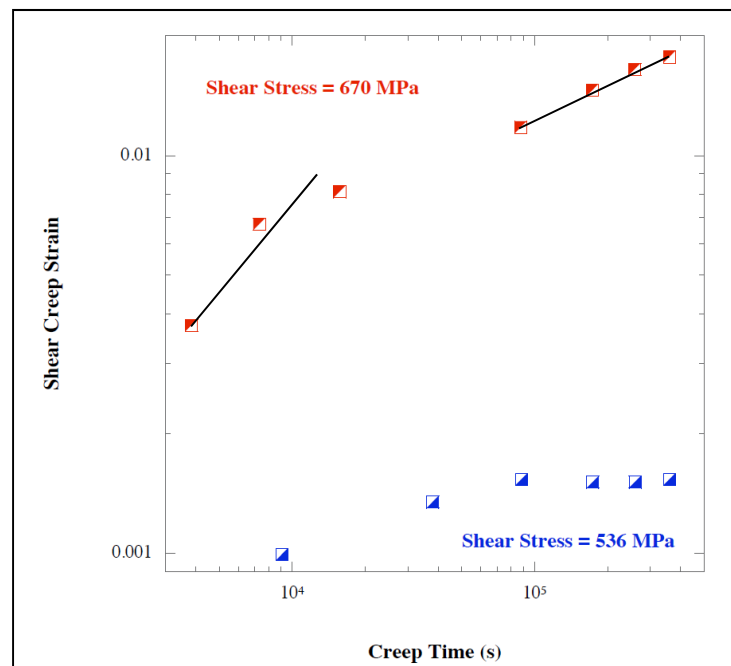


Figure 1-14 Diminution du taux de déformation au cours du fluage à froid pour un alliage Ti-6Al-4V, tirée et adaptée de (Brandes, 2008)

Des chercheurs de l'université d'Ohio State (Neeraj, 2000; Savage, 2000) ont réalisé certaines études sur l'activation des systèmes de glissement d'un alliage Ti-6Al-4V en fluage à froid sous différents chargements (60%, 80% et 90% de la limite d'élasticité conventionnelle). Ils montrent que les systèmes de glissement prismatiques  $\{10\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$

et les systèmes basaux  $(0001) \langle 11\bar{2}0 \rangle$  s'activent le plus, durant le fluage à froid et les autres systèmes de glissement sont moins activés.

En effet, le fluage à froid dans les alliages de titane est expliqué par trois mécanismes décrits dans la littérature, un mécanisme macroscopique et deux mécanismes microscopiques (Neeraj, 2000; Odegard, 1974) :

- 1) La sensibilité élevée des alliages de titane au taux de déformation est considérée par certains auteurs comme étant la raison du fluage des alliages de titane (Odegard, 1974). Cependant, la sensibilité au taux de déformation des alliages de titane n'est pas plus élevée en comparaison de celle d'autres matériaux non sensibles au fluage à froid (Daehn, 2001; Neeraj, 2000). Donc, seul cet argument ne peut pas justifier le fluage à froid des alliages de titane.
- 2) Le libre parcours moyen des dislocations influence fortement le comportement en fluage des alliages de titane comme l'ont montré certains auteurs (W. H. Miller, 1987). Il a été démontré que les microstructures avec un libre parcours moyen plus grand, présentent une résistance faible au fluage à froid. Cependant, cela est un argument fort et les auteurs ne précisent pas les mécanismes qui expliquent cet effet.

L'activation de sources de dislocations est connue pour être plus aisée pour certaines microstructures des alliages de titane durant le fluage. Par exemple, Odegard *et al.* (Odegard, 1974) ont montré que les joints de lamelles d'un alliage Ti5-2-5 étaient les sources privilégiées de dislocations. Ces mêmes auteurs montrent que l'historique thermomécanique de l'alliage, et les champs de dislocations induits localement, facilitent ou limitent l'activation de nouvelles dislocations. Il est intéressant de préciser que ces sources de dislocations peuvent s'activer à un niveau de charge égal à 60% de la limite d'élasticité conventionnelle.

### 1.3.5 Mécanisme de déformation des alliages de titane en dwell-fatigue

Wang *et al.* (Wang *et al.*, 2007) ont étudié les micromécanismes de déformation d'un alliage IMI834 en dwell-fatigue sous un niveau de charge de 827 MPa (la limite d'élasticité conventionnelle de l'alliage n'est pas mentionnée par les auteurs) avec un temps de dwell de 30 secondes. L'alliage étudié a une microstructure bimodale avec 20% des grains alpha primaire. Ils ont observé que la majorité des systèmes de glissement activés correspondent aux dislocations de type  $\langle a \rangle$  (basal et prismatique). Il a été observé que ces systèmes de glissement s'activent en premier dans les nodules  $\alpha$ . Cela a été expliqué par l'augmentation de la densité de dislocations dans les joints de grains (phase bêta) au cours de chargement qui bloque la plasticité dans les lamelles  $\alpha$ . Par ailleurs, ils ont démontré que l'activation des systèmes de glissement basaux conduit à l'apparition de bandes de glissement dans les nodules qui peuvent traverser les joints de grains. Cependant, la phase bêta, aux joints de grains, ne construit pas un obstacle fort devant le mouvement de ces bandes de glissement. Le mouvement des dislocations dans les bandes de glissement conduit à la formation de sous-grains et à l'activation de plans prismatiques et pyramidaux dans un même grain. Cela conduit à l'amorçage de fissures dans les nodules. Les fissures observées par Wang *et al.* se trouvent sous la surface et dans des nodules avec une orientation proche à  $45^\circ$  par rapport à la direction de chargement. Des résultats semblables à ceux de Wang ont été observés par Sackett *et al.* (Sackett, 2007). Ils montrent que les systèmes de glissement prismatiques sont les systèmes qui s'activent en premier et typiquement, ils sont associés à un certain niveau de déformation plastique.

De ces observations, il apparaît nécessaire de mieux connaître les micromécanismes qui pilotent les déformations dans les microstructures des alliages de titane.

## 1.4 Mécanismes d'endommagement des alliages de titane en dwell-fatigue

Les micromécanismes contrôlant la fissuration des alliages de titane en dwell-fatigue ne sont pas encore complètement connus. Mais, certains aspects d'endommagement ont été

confirmés par les chercheurs dans la littérature. Les prochains paragraphes présentent brièvement ces aspects.

#### **1.4.1 Facettes observées sur la surface de rupture en dwell-fatigue**

Pour pouvoir prédire la durée de vie d'un alliage de titane en dwell-fatigue, la connaissance précise des mécanismes d'endommagement est essentielle. L'amorçage d'une fissure dans un alliage de titane bimodal sous chargement cyclique peut être associée à l'accumulation de déformation plastique locale et à la formation de « facettes ». Une facette peut être définie comme une surface plane de type clivage ou quasi-clivage observée sur le faciès de rupture des pièces qui subissent un chargement de dwell-fatigue. Les facettes produites par dwell-fatigue se trouvent généralement en sous-surface des pièces (Wang *et al.*, 2007). De telles facettes sont observées d'ailleurs soit au niveau du site d'amorçage, soit dans la zone de propagation de fissures (Uta, 2009). Dans notre étude, on s'intéresse aux facettes produites par l'amorçage.

Il y a un accord général dans toute la littérature sur la présence de facettes sur le faciès de rupture en dwell-fatigue. Les facettes se forment généralement dans des grains alpha primaire (Bache, 2003b; Evans, 1994; Sinha, 2007; Toubal, 2009; Uta, 2009). Cependant, ces facettes peuvent être divisées en deux catégories : les facettes d'amorçage et les facettes de propagation. Des chercheurs comme Williams, Sinha et Shen (Shen, 2004; Sinha, 2007; Uta, 2009; Williams, 2002) montrent que les sites d'amorçage observé sur les facettes de rupture en dwell-fatigue sont plutôt de type quasi-clivage et les plans de formation des facettes ne sont pas forcément perpendiculaire à l'axe de chargement mais sont plutôt orientés entre  $15^\circ$  à  $25^\circ$ . Les observations de Bridier (Bridier, 2008) montrent ainsi que les grains ayant amorcé une fissure ne sont pas orientés avec le plan basal perpendiculaire à la direction de sollicitation. Ces grains sont orientés avec un plan basal incliné de 20 à 30 degrés par rapport à la direction de sollicitation macroscopique. Certains chercheurs comme Evans et Bache (Bache, 2003a; Evans, 1994) suggèrent que les facettes de propagation sont de type de clivage et sont orientées proche de l'axe de sollicitation. La Figure 1-15a montre des facettes

observées par ces chercheurs sur une surface de rupture d'un disque d'un alliage d'IMI 834 ayant subi un chargement de dwell-fatigue à froid. Les sites de propagation dans lesquelles les facettes sont formées se trouvent dans des plans basaux des grains orientés de  $0^\circ$  à  $25^\circ$  (Figure 1-15b). Les auteurs ne précisent pas l'orientation des grains dans lesquels les sites d'amorçage se trouvent. Les paragraphes qui suivent présentent différents mécanismes proposés sur l'amorçage de fissures et la formation des facettes en dwell-fatigue à froid.

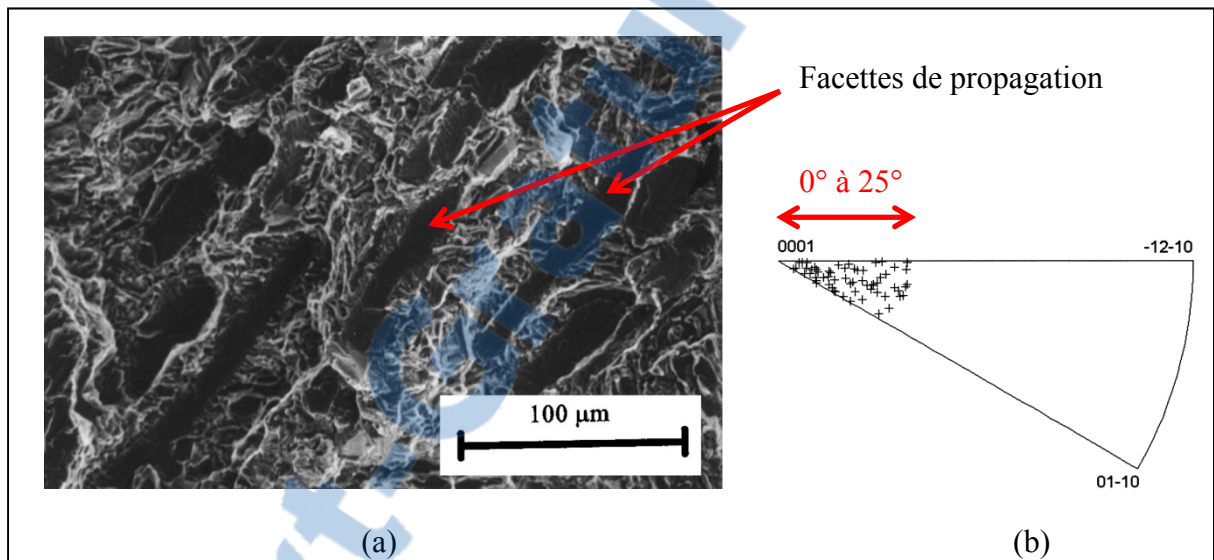


Figure 1-15 a) Facettes de rupture (propagation) observées dans un disque d'un alliage d'IMI 834, b) Projection de l'orientation des grains clivés dans un triangle standard, tirée de (Bache, 1997)

#### 1.4.2 Mécanismes basés sur la contrainte normale maximale

Un des mécanismes proposé pour décrire la formation des facettes peut être expliqué par les contraintes normales créées dans certains grains en cours de service. Stroh (Stroh, 1960) a proposé un mécanisme qui décrit la formation des facettes dans les grains à partir de leurs orientations et de l'orientation des grains voisins. D'après Stroh, la formation des facettes est due à un transfert de déformation d'un grain favorablement orienté pour le glissement plastique (grain avec un facteur de Schmid élevé sur les systèmes basaux et prismatiques) à un grain défavorablement orienté (grain avec un facteur de Schmid faible sur les systèmes basaux et prismatiques). Les grains défavorablement orientés sont généralement des grains

pour lesquels le plan basal est perpendiculaire à la direction principale de sollicitation (grain dur). L'accumulation de déformation dans les grains favorablement orientés (grain souple) induit des contraintes supplémentaires dans les grains défavorablement orientés au niveau des joints de grains. La densité de dislocations sur le joint de grains déformés augmente et produit des contraintes normales au plan basal dans le grain dur. L'ensemble des contraintes appliquées et le transfert de contrainte induit par le grain souple dans le grain dur peut entraîner l'amorçage d'une fissure dite de clivage sur le plan basal (Figure 1-16).

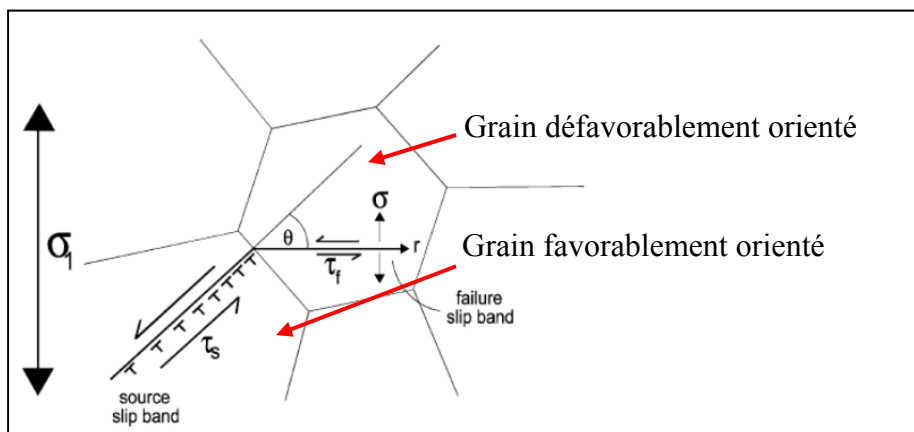


Figure 1-16 Mécanisme de Stroh, tirée de (Whittaker, 2009)

Plusieurs chercheurs comme (Anahid, Samal et Ghosh, 2011; Bache, 2003a; 1997; Dunne, 2007; Evans, 1994; Neal, 1976) ont proposé que la contrainte normale sur le plan basal d'un grain dur est la cause principale de la formation des facettes.

Ce critère ne prévoit pas les bons sites d'amorçage de fissure (plan basaux avec l'axe  $c$  de  $15^\circ$  à  $30^\circ$  de l'axe de chargement), ne rend pas compte de l'effet de la taille et aussi des macrozones.

#### 1.4.3 Mécanismes basés sur la déformation plastique seule

D'autres chercheurs ont obtenu des résultats qui peuvent expliquer que les sites d'amorçage ne soient pas normaux à l'axe de traction. Ils proposent un mécanisme basé sur le glissement



cristallin pour expliquer la formation des facettes. L'analyse effectuée par Sinha (Sinha, 2007) sur trois sites d'amorçage en dwell-fatigue montre que les facettes ont été formées sur les plans basaux orientés de  $14^\circ$  à  $20^\circ$  par rapport à la direction de chargement.

Pilchak (Pilchak et Williams, 2011) propose que les glissements purs sont les mécanismes dominant dans la formation des facettes. Selon Pilchak, le mouvement des dislocations à la frontière entre un grain alpha primaire et une colonie de lamelles dans lesquelles les systèmes de glissement sont proches augmente la densité de dislocations aux joints de grains et cause l'amorçage de fissures.

#### **1.4.4 Mécanismes pondérant la contrainte normale maximale et la déformation plastique maximale**

Certains auteurs proposent un mécanisme combiné de contrainte normale et de glissement cristallin pour expliquer la formation des facettes dans les alliages de titane (Bridier, 2008; Germain *et al.*, 2005; Jha *et al.*, 2012; Sackett, 2007).

Les travaux de Sackett montrent que l'amorçage de fissure en dwell-fatigue n'est pas nécessairement seulement dû à une contrainte critique sur le plan basal des grains durs. Ils montrent que des fissures peuvent être amorcées sans l'intervention des plans basaux. Dans le travail de Sackett, le plan basal le plus perpendiculaire à la direction de traction dans la zone de fissure est orienté à  $17^\circ$ .

Les résultats expérimentaux de Bridier *et al.* (Bridier, 2008) ne peuvent pas non plus être expliqués par le simple mécanisme de Stroh. En effet, les observations de Bridier montrent que les sites d'amorçage sont inclinés par rapport l'axe de chargement, ce qui indique non seulement une contrainte normale élevée favorable au clivage, mais également une contrainte de cisaillement élevée sur le système basal donc favorable au glissement. L'amorçage de fissure est donc considéré comme étant la résultante d'une double condition de plasticité et de contrainte normale. Ce mécanisme est classiquement appelé aujourd'hui mécanisme de

« pseudo-clivage » ou « quasi-clivage ». Alors que le modèle de Stroh considère le problème à l'échelle des grains, Bridier considère le problème à l'échelle des macrozones pour étudier le comportement microstructural des alliages de titane. D'autres auteurs (Blenkinsop, 1996; Bridier, 2008; Germain *et al.*, 2008) affirment également que la réduction de la durée de vie est surtout liée à la présence des macrozones. Ils proposent de considérer la déformation globale des macrozones à l'échelle mésoscopique.

Des résultats semblables à ceux de Bridier ont été présentés par Jha (Jha *et al.*, 2012) dans le cadre de ses travaux sur un alliage de Ti-6Al-4V. Il montre que les facettes observées en fatigue ne sont pas perpendiculaires à l'axe de sollicitation mais sont orientées à 30° de l'axe de chargement. Il suggère qu'un mécanisme qui rend compte d'une combinaison de glissement cristallin et de contrainte normale sur les plans basaux peut expliquer la formation des facettes.

Il est clair que les mécanismes provoquant l'amorçage de fissures et la formation des facettes en dwell-fatigue sont très complexes et ne peuvent pas être expliqués par de simples mécanismes présentés ici. Plusieurs facteurs comme la composition chimique du matériau, la morphologie et la taille des grains, les effets environnementaux et surtout la présence des macrozones influencent les mécanismes contrôlant l'amorçage des fissures.

### **1.5 Localisation de déformation : une approche basée sur la solution d'Eshelby pour une inclusion plongée dans un milieu infini**

À la suite de la section précédente, il semble que la réduction de la durée de vie des alliages de titane pourrait être expliquée par un modèle qui prend en compte différentes échelles d'hétérogénéités de la microstructure à l'échelle des grains ainsi qu'à l'échelle des macrozones.

Dans le domaine des milieux hétérogènes, Eshelby (Eshelby, 1957) a proposé une solution pour calculer les champs mécaniques d'une inclusion ellipsoïdale plongée dans une matrice homogène d'extension infinie. Eshelby suggère que si la matrice subit un chargement

uniforme à l'infini, et si l'inclusion et la matrice suivent un comportement élastique linéaire, les champs de contrainte et de déformation dans l'inclusion sont uniformes et peuvent être calculés analytiquement au moyen d'intégrales elliptiques. La solution d'inclusion d'Eshelby, remplace la matrice hétérogène par une matrice homogène, mais avec des propriétés modifiées qui prennent en compte des interactions entre les hétérogénéités. Cette théorie est une base fondamentale des théories des milieux hétérogènes et permet de décrire leurs propriétés effectives.

La relation entre la déformation de l'inclusion  $\underline{\underline{\varepsilon}}^I$  et la déformation macroscopique imposée à la matrice  $\underline{\underline{E}}^0$  peut être exprimée par un tenseur de localisation  $A_{Esh}$  :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^I = A_{Esh} : \underline{\underline{E}}^0 \quad (1.1)$$

où les deux barres ' = ' en dessous des lettres caractérisent un tenseur d'ordre 2. Les indices « 0 » et « I » sont utilisés pour la matrice et l'inclusion, respectivement.

Le tenseur de localisation dépend des tenseurs d'élasticité de la matrice et de l'inclusion, ainsi que la morphologie de l'inclusion via le tenseur d'Eshelby.

Dans notre étude, une règle de transition d'échelle basée sur la solution d'Eshelby est utilisée pour une inclusion hétérogène non chargée, plongée dans une matrice chargée à l'infinie. Afin d'arriver à cette solution, la solution d'inclusion d'Eshelby est détaillée pour des inclusions homogène puis hétérogène.

### 1.5.1 Inclusion homogène

Dans cette section, la solution d'inclusion d'Eshelby est détaillée pour deux cas d'inclusion homogène. On appelle inclusion homogène, une inclusion ayant les mêmes propriétés élastiques que la matrice. Le premier cas consiste en une inclusion homogène chargée,

plongée dans une matrice non chargée. Et, le deuxième cas traite la solution d'une inclusion homogène non chargée plongée dans une matrice chargée à l'infini. Ces deux solutions constituent les premiers pas pour traiter le comportement mécanique d'une inclusion hétérogène. Il faut rappeler que le problème d'inclusion d'Eshelby a été résolu en élasticité.

### 1.5.1.1 Inclusion homogène ayant subi une déformation libre, plongée dans une matrice infinie non chargée

Une inclusion élastique ayant un volume  $\Omega_I$  est plongée dans une matrice infinie élastique de volume  $\Omega_0$  (Figure 1-17) où la matrice et l'inclusion ont les mêmes propriétés élastiques (homogènes). Le changement du volume associé à l'inclusion introduit des champs de contrainte et de déformation dans l'inclusion. Il est possible d'estimer ces champs mécaniques en supposant que ce changement du volume a été introduit par une déformation libre. Donc, une déformation libre  $\underline{\underline{\varepsilon}}_L^*$  est imposée sur l'inclusion, mais la matrice est non chargée. La solution d'Eshelby pour calculer la déformation dans l'inclusion est présentée comme la suite en considérant deux hypothèses : 1) l'inclusion est ellipsoïdale et 2) la déformation libre sur l'inclusion est uniforme (Eshelby, 1957; François, 1991) :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^I = \mathbf{S}_{Esh}^0 : \underline{\underline{\varepsilon}}_L^* \quad (1.2)$$

où  $\mathbf{S}_{Esh}^0$  est le tenseur d'Eshelby et il ne dépend que de la morphologie de l'inclusion.

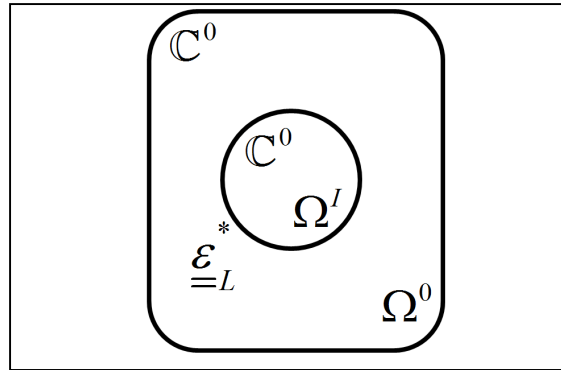


Figure 1-17 Une inclusion homogène ayant subi une déformation libre, plongée dans une matrice infinie non chargée

En élasticité la relation entre la contrainte et la déformation dans l'inclusion s'écrit :

$$\underline{\underline{\sigma}}^I = C^0 : (\underline{\underline{\varepsilon}}^I - \underline{\underline{\varepsilon}}_L^*) \quad (1.3)$$

où  $C^0$  est le tenseur d'ordre 4 des constantes d'élasticité de la matrice. On peut ainsi calculer la contrainte dans l'inclusion générée par le changement du volume en remplaçant l'équation (1.2) dans l'équation (1.3) comme :

$$\underline{\underline{\sigma}}^I = C^0 : (S_{Esh}^0 - I) : \underline{\underline{\varepsilon}}_L^* \quad (1.4)$$

où  $I$  est la matrice d'identité d'ordre 4.

### 1.5.1.2 Inclusion homogène non chargée, plongée dans une matrice infinie ayant subi un chargement à infini

La solution précédente permet de résoudre d'autres types de problèmes. Ici, on traite le cas d'une inclusion élastique  $\Omega_I$  plongée dans une matrice infinie élastique  $\Omega_0$  ayant subi un chargement à l'infini (Figure 1-18). Dans ce cas aussi la matrice et l'inclusion sont homogènes. Si les hypothèses d'Eshelby (inclusion ellipsoïdale et chargement uniforme) sont

prises en compte, la déformation de l'inclusion devient (François, 2009) :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^I = \mathbf{S}_{Esh}^0 : \underline{\underline{\varepsilon}}_L^* + \underline{\underline{E}}^0 \quad (1.5)$$

Ensuite, la contrainte dans l'inclusion (Éq.(1.6)) est obtenue par l'équation d'élasticité linéaire (Éq. (1.3)) :

$$\underline{\underline{\sigma}}^I = \mathbf{C}^0 : (\mathbf{S}_{Esh}^0 - \mathbf{I}) : \underline{\underline{\varepsilon}}_L^* + \underline{\underline{\Sigma}}^0 \quad (1.6)$$

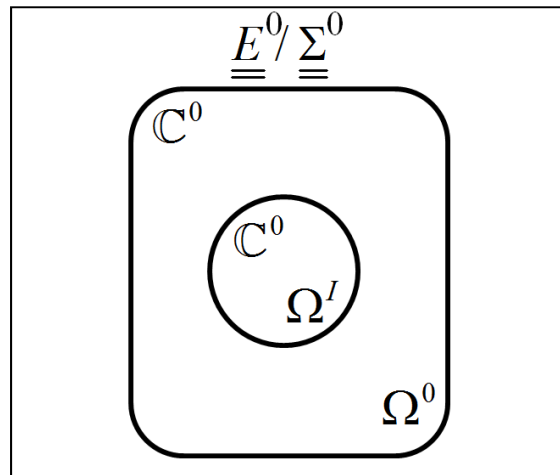


Figure 1-18 Une inclusion homogène non chargée plongée dans une matrice infinie chargée à l'infinie

### 1.5.2 Inclusion hétérogène

Étant donné que le matériau étudié dans notre recherche est un matériau hétérogène, on s'intéresse à résoudre le problème d'Eshelby pour une inclusion hétérogène. Ici, la solution d'Eshelby est adaptée pour une inclusion hétérogène non chargée, entourée par une matrice chargée à l'infinie. La solution obtenue dans cette section servira plus loin dans cette thèse pour développer une règle de transition d'échelle. Cette règle permet le calcul des champs mécaniques d'un grain dans une microstructure subissant une charge macroscopique. Dans

cette étude, chaque grain de la microstructure est considéré comme une inclusion hétérogène plongée dans une matrice.

**Inclusion hétérogène non chargée, plongée dans une matrice infinie ayant subi un chargement à l'infini :**

Imaginons une inclusion sphérique non chargée  $\Omega_I$  ayant le tenseur d'élasticité  $C^I$  plongée dans une matrice élastique  $\Omega_0$  ayant le tenseur d'élasticité  $C^0$  (Figure 1-19). Un chargement uniforme est appliqué sur la matrice à l'infini ( $\underline{\underline{E}}^0 / \underline{\underline{\Sigma}}^0$ ).

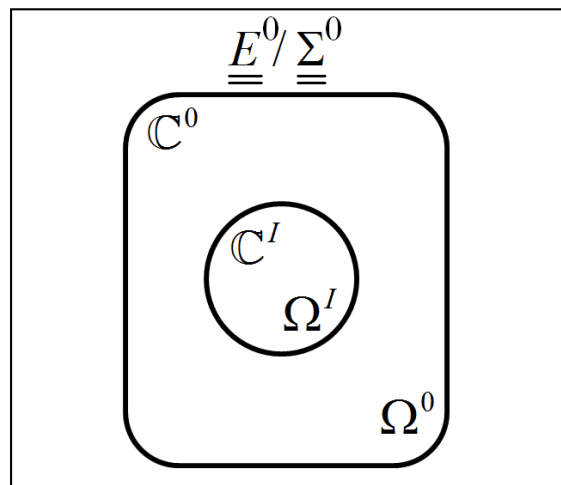


Figure 1-19 Une inclusion hétérogène non chargée plongée dans une matrice infinie chargée à l'infinie

Pour estimer le champ de contrainte et de déformations dans l'inclusion, le principe de superposition en élasticité linéaire peut être utilisé. Pour cela, on divise ce problème en deux ce qui revient à résoudre les problèmes d'inclusion homogène résolus précédemment (Figure 1-20) : le premier problème est une inclusion homogène sous une déformation libre uniforme  $\underline{\underline{\varepsilon}}_L^*$  dans une matrice non chargée, et l'autre un problème avec une inclusion homogène non chargée dans une matrice chargée uniformément à l'infini. La déformation libre imposée sur l'inclusion reproduit l'effet de l'hétérogénéité de l'inclusion.

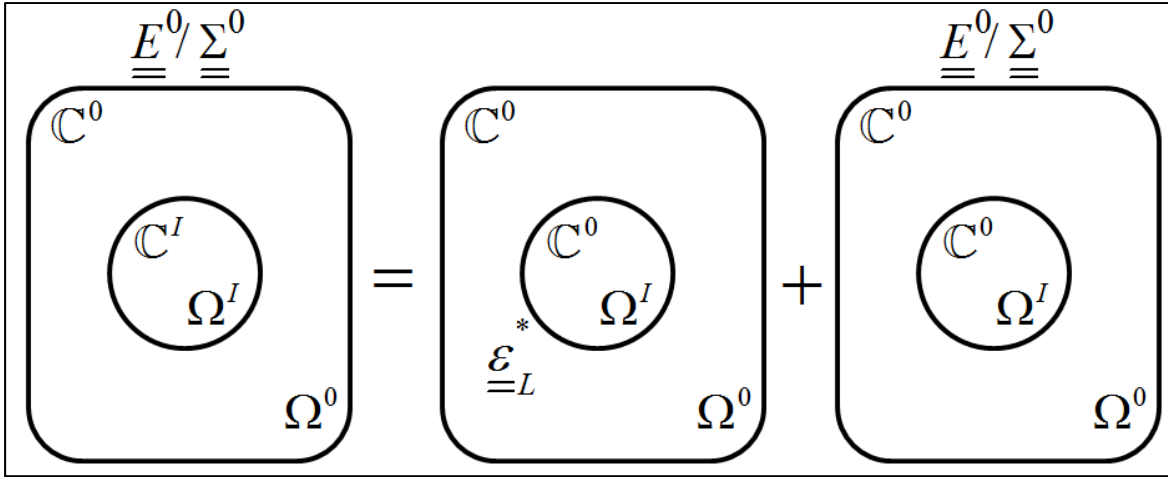


Figure 1-20 Schéma de superposition des solutions d'inclusion homogène pour résoudre le problème d'inclusion hétérogène

En superposant les deux solutions précédentes, on obtient la déformation libre comme (François, 1991) :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_L^* = [(\underline{C}^I - \underline{C}^0) : \underline{S}_{Esh}^0 + \underline{C}^I]^{-1} : (\underline{C}^0 - \underline{C}^I) : \underline{\underline{E}}^0 \quad (1.7)$$

Finalement, on obtient la déformation et la contrainte dans l'inclusion :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^I = [\underline{I} + \underline{S}_{Esh}^0 : (\underline{C}^0)^{-1} : (\underline{C}^I - \underline{C}^0)]^{-1} : \underline{\underline{E}}^0 \quad (1.8)$$

$$\underline{\underline{\sigma}}^I = \underline{C}^0 : (\underline{S}_{Esh}^0 - \underline{I}) : \underline{\underline{\varepsilon}}_L^* + \underline{\underline{\Sigma}}^0 \quad (1.9)$$

## 1.6 Outils de simulation numérique du comportement mécanique prenant en compte une description micromécanique

Plusieurs outils de calcul micro/macro mécaniques sont utilisés pour prédire le comportement local des matériaux. Dans cette section, trois méthodes de simulation sont présentées et les avantages et les inconvénients de chacune mentionnés.



### 1.6.1 Méthode Auto-Cohérente

Le modèle auto-cohérent a été développé par Hill (1965) pour étudier le comportement micromécanique des matériaux en élastoplasticité. Cette méthode fondée sur la solution d'inclusion d'Eshelby, décrit le milieu hétérogène étudié par un milieu homogène équivalent (MHE) dont le comportement est à déterminer. La plupart du temps la microstructure du MHE est considérée comme un milieu parfaitement désordonnée (même rôle pour toutes les phases). Le comportement de chaque grain est alors obtenu en considérant chaque grain comme une inclusion dans le MHE. Cette méthode a notamment été utilisée pour des matériaux biphasés, des composites et des matériaux contenant des cavités sphériques (Parenteau, 2009). Le calcul des propriétés du MHE tient compte des formes des phases et de leurs propriétés mécaniques (ex. propriétés élastiques).

L'approche auto-cohérente suppose un milieu homogène équivalent ce qui limite l'étude des effets de la distribution spatiale des hétérogénéités de morphologie, de phase ou d'orientation. Ainsi, on ne peut pas, par exemple, représenter deux macrozones sur un même automate cellulaire, car cela constitue deux domaines avec des distributions en orientation cristallographique très différentes (deux textures cristallographiques). Dans ce cas, les conditions de MHE ne sont plus vérifiées. Ce dernier point est crucial et sera un des aspects limitant de cette approche, notamment pour l'étude de l'effet de voisinage. Aussi, ce modèle ne donne pas de prévision sur l'influence de la distribution spatiale de phase ou sur l'évolution des paramètres mécaniques locaux. Donc, ce modèle ne peut pas prendre en compte les aspects extrêmes de la statistique du comportement des alliages (comme le comportement d'un grain dur ou mou dans le MHE).

### 1.6.2 Méthode des Éléments Finis (ÉF)

Plusieurs chercheurs ont utilisé la méthode des ÉF pour modéliser le comportement mécanique des alliages de titane en fatigue, fluage et dwell-fatigue. Quilici et *al.* (Quilici et Cailletaud, 1999) ont utilisé un domaine cubique discrétisé par ÉF contenant plusieurs

centaines de grains afin d'étudier la réponse mécanique d'un matériau polycristallin à différentes échelles.

Hasija (Hasija *et al.*, 2003) a utilisé la méthode ÉF pour étudier le mécanisme de déformation en fluage des polycristaux HCP d'un alliage de titane. Il a utilisé un modèle de plasticité cristalline dépendant du temps pour modéliser la distribution de contrainte locale. Ses résultats montrent que le glissement arrive en premier dans des grains favorablement orientés pour des glissements prismatiques et basaux. Avec la déformation de ces grains, leurs contraintes chutent et leurs déformations se transfèrent aux grains voisins. Ce qui cause l'accumulation de dislocations aux joints de grains défavorablement orientés et en conséquence, l'augmentation de leurs contraintes. Hasija suggère que ces grains durs construisent des sites préférentiels pour l'amorçage de fissure en fluage et en dwell-fatigue.

Plus tard, un agrégat cubique en ÉF est modélisé par Diard *et al.* (Diard *et al.*, 2005) afin d'étudier le comportement micro-plastique des matériaux hétérogènes ayant une microstructure cristalline HCP. En 2006, Deka *et al.* (Deka *et al.*, 2006) ont étendu le modèle de Hasija (Hasija *et al.*, 2003) pour modéliser le fluage en deux phases alpha et bêta d'un alliage de titane Ti-6242. Le modèle de Deka est capable de prédire certains effets de l'évolution des contraintes et des déformations locales et l'amorçage des fissures dans les grains durs. Les résultats obtenus par Deka sont proches de ceux obtenus par Hasija et ils confirment l'effet de la contrainte normale sur les plans basaux des grains durs comme un mécanisme valide d'amorçage de fissure.

Zhang *et al.* (Zhang, 2007) ont proposé un modèle ÉF basé sur la plasticité cristalline pour étudier la réponse contrainte-déformation d'une microstructure d'un alliage de titane sous un chargement cyclique à froid. Dunne *et al.* (Dunne et Rugg, 2008; Dunne, 2007) ont concentré leurs études sur les effets de l'orientation cristallographique et de la morphologie des grains alpha primaire d'un alliage de titane en dwell-fatigue à froid. Dans leur modèle ÉF, Dunne *et al.* proposent une combinaison de grains favorisant l'amorçage des fissures par le mécanisme de Stroh afin d'expliquer la formation des facettes dans les alliages de titane en dwell-

fatigue. Cette combinaison appelée « rouge grain combination » suggère que quand un grain dur (avec un axe  $c$  parallèle à l'axe du chargement) se trouve au voisinage d'un grain mou, ce grain mou transfère sa déformation sur le grain dur. Cela augmente considérablement la contrainte normale sur le plan basal du grain dur qui peut conduire à l'amorçage d'une fissure.

Le modèle de Zhang *et al.* (Zhang, 2007) a été étendu par Bridier *et al.* (Bridier, 2009) afin de comparer les résultats obtenus par ce modèle ÉF avec les observations expérimentales d'activation de systèmes de glissement d'un alliage de Ti-6Al-4V en HCF. Bridier propose que l'amorçage de fissure implique non seulement des contraintes normales élevées mais aussi un niveau de déformation plastique important. Ainsi, les sites préférentiels d'amorçage se trouvent dans des grains avec leur axe  $c$  orienté de  $14^\circ$  à  $20^\circ$  par rapport la direction de chargement. Barbe *et al.* (Barbe *et al.*, 2009) ont modélisé en ÉF, un agrégat polycristallin de 2197 grains pour caractériser la distribution de la déformation sous un chargement élastoplastique. L'étude de Barbe ne traite pas des grains critiques et elle est concentrée sur la localisation et la distribution de la déformation locale.

Récemment, Doquet *et al.* (Doquet, 2012) ont étudié le comportement d'un alliage de titane Ti-6Al-4V en dwell-fatigue à température ambiante. Ils proposent des modèles basés sur la plasticité cristalline capables de prendre en compte l'influence de l'anisotropie ainsi que l'effet de la multiaxialité de contrainte sur l'amorçage de fissures. Ils ont essayé de décrire l'effet de l'introduction d'une période de fluage sur la durée de vie. Doquet précise que les méthodes actuelles de calcul de la durée de vie en fatigue ne peuvent pas capturer les effets désavantageux du maintien de temps (fluage) dans un chargement de fatigue-fluage à froid.

La méthode des éléments finis est un bon moyen pour simuler le comportement d'un matériau, car elle peut associer les propriétés locales du matériau à chaque élément modélisé. Ainsi, la localisation de contraintes et de déformation dans cette méthode se fait « naturellement » (c'est-à-dire, sans règle de transition d'échelle pour le passage micro-macro comme dans la méthode des automates cellulaires). Cette méthode permet aussi l'étude de

l'effet du voisinage sur le grain étudié. Par contre, la modélisation de l'aspect statistique du comportement des alliages de titane par cette méthode est un défi car mailler les microstructures, définir le comportement du matériau, etc. demande des moyens informatiques très performants et le temps du calcul par cette méthode reste très élevé. Ainsi, le nombre des grains et le nombre de cycles en fatigue qui peuvent être modélisés par cette méthode sont limités. Mayeur et *al.* (Mayeur, 2007) ont utilisé les ÉF pour développer un modèle 3D basé sur la plasticité cristalline qui modélise le comportement micromécanique d'un alliage de titane Ti-6Al-4V ayant une microstructure biphasée, mais leur modélisation se limite à des chargements monotones. Un autre exemple des limites des approches ÉF peut être observé dans les travaux de Przybyla et *al.* (Przybyla *et al.*, 2008) où seulement trois cycles de fatigue ont été modélisés par leur modèle. Finalement, l'approche ÉF reste une méthode couteuse au niveau du temps et des moyens informatiques, ce qui favorise la tendance vers des méthodes alternatives qui n'ont pas ces limites comme la méthode des automates cellulaires. En comparaison des ÉF, le modèle des automates cellulaires est un modèle simple qui permet de modéliser et traiter un grand nombre des grains avec des comportements mécaniques complexes dans une courte durée. L'aspect statistique et l'effet du voisinage peuvent être étudiés par cette méthode.

### **1.6.3 Méthode des automates cellulaires**

L'approche « Automate Cellulaire (AC) » est un système dynamique de calcul qui consiste en un certain nombre de cellules ayant des interactions locales. Chaque cellule possède un état qui évolue au cours de temps en fonction de son état et de celui de son voisinage. Les étapes principales de création d'un automate cellulaire sont les suivantes (Montheillet, 1996) :

- Considérer un domaine de l'espace comme un réseau des cellules en 1D, 2D ou 3D.
- Définir les cellules voisines d'une cellule considérée.
- Définir une ou plusieurs variables d'état.

- Définir une fonction de transition de l'état initial «  $n$  » à l'état suivant «  $n+1$  » pour une cellule connaissant l'état de son voisinage.

La Figure 1-21 (a) présente un exemple d'un domaine d'automates cellulaires hexagonal illustré en 2D. Chaque cellule de ce domaine voit 6 cellules comme ses voisins immédiats. Un domaine d'automate cellulaire rectangulaire avec 8 voisins immédiats pour chaque cellule est présenté dans la Figure 1-21 (b). Dans cette étude, l'automate cellulaire hexagonal est utilisé pour représenter une microstructure 3D.

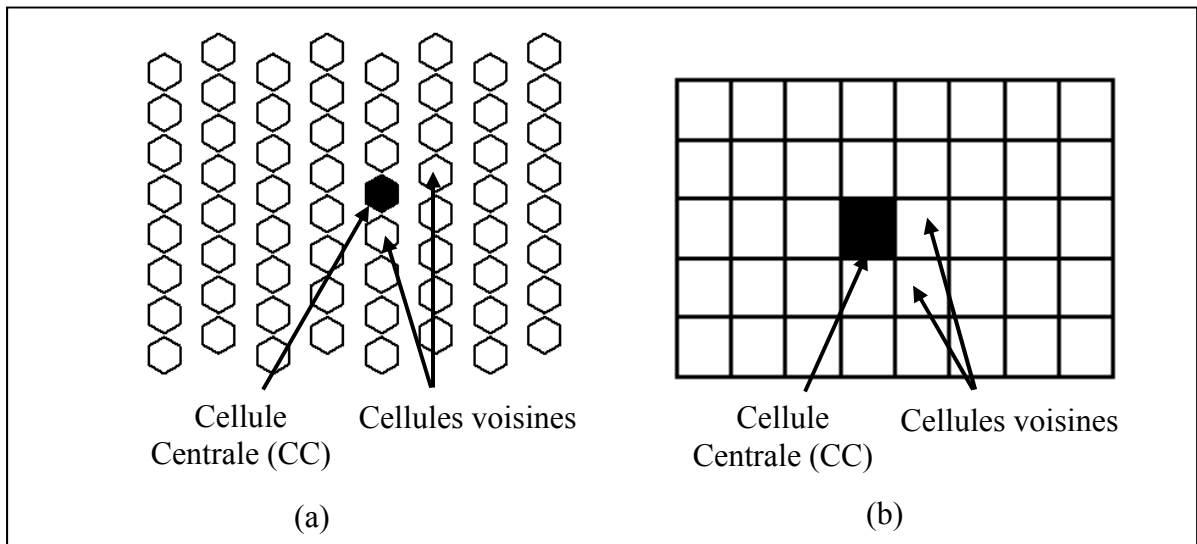


Figure 1-21 Un domaine d'automates cellulaires (a) hexagonal avec 6 cellules voisines immédiates (b) rectangulaire avec 8 cellules voisines immédiates

### Fonction de voisinage :

Dans un domaine d'automates cellulaires, chaque cellule est entourée de cellules voisines et la définition de la notion de voisinage est très importante. L'état d'une cellule étudiée au temps  $t+1$  dépend de son état ainsi que de celui de ses voisines au temps  $t$ . Une fonction de transition de l'état est nécessaire pour actualiser l'état de chaque cellule au temps  $t+1$ . Pour un domaine d'automates cellulaires 2D Neumann (Neumann, 1963; S. El Yacoubi., 2006) a proposé une fonction de transition de l'état pour un environnement du voisinage contenant

quatre voisins orthogonaux qui entourent la cellule centrale (Figure 1-22a). Cette fonction est détaillée dans l'équation (1.10).

$$x_{i,j}^{n+1} = f(x_{i-1,j}^n, x_{i,j}^n, x_{i+1,j}^n, x_{i,j+1}^n, x_{i,j-1}^n) \quad (1.10)$$

où  $i$  et  $j$  représentent les coordonnées des cellules dans l'espace.

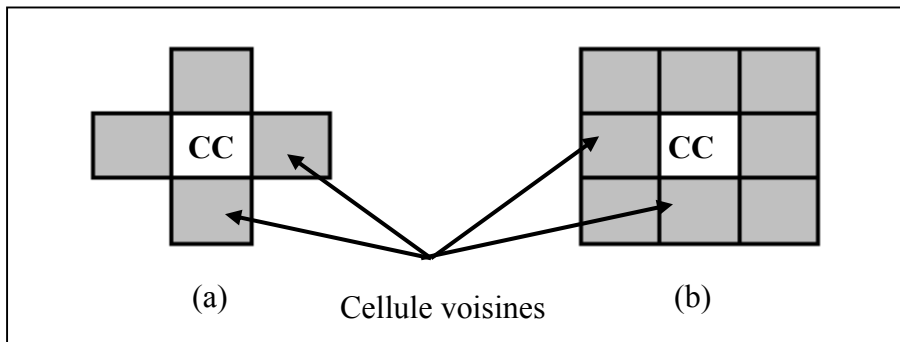


Figure 1-22 (a) Environnement de Neumann avec 4 cellules voisines (b) Environnement de Moore avec 8 cellules voisines

Une autre fonction de transition d'état qui prend en compte 8 voisins dans un domaine 2D a été présenté par Moore (Moore, 1962; S. El Yacoubi., 2006). La Figure 1-22b présente le voisinage défini par cette méthode. Cette fonction de transition d'état peut être écrite comme:

$$x_{i,j}^{n+1} = f(x_{i-1,j}^n, x_{i,j}^n, x_{i+1,j}^n, x_{i,j+1}^n, x_{i,j-1}^n, x_{i-1,j-1}^n, x_{i+1,j-1}^n, x_{i+1,j+1}^n) \quad (1.11)$$

Dans ce travail de recherche, une fonction de transition d'état basée sur l'environnement de Moore est adaptée pour introduire un environnement du voisinage hexagonal. Ce voisinage prend en compte 6 cellules voisines.

Considérant la simplicité de cette méthode face à la complexité des phénomènes qu'il peut décrire, l'automate cellulaire est une méthode de calcul qui s'avère très intéressante pour notre sujet d'étude. Elle permet de générer des microstructures dans un milieu virtuel sans les

limites du modèle des éléments finis. L'AC peut prendre en compte différentes échelles d'hétérogénéité en respectant l'aspect statistique du comportement du matériau. Ainsi, il y a la possibilité d'associer des propriétés mécaniques à chaque cellule séparément. En conséquence, en associant des propriétés mécaniques obtenues à des essais expérimentaux, il est possible d'étudier le comportement de microstructures réalistes. Le temps de calcul par cette méthode est faible et autorise donc de simuler un très grand nombre de grains et ainsi de générer une population statistiquement représentative d'une microstructure réelle. Cependant, la localisation dans cette méthode nécessite une règle de transition d'échelle (comme la solution d'inclusion d'Eshelby, etc.) qui permet le passage micro-macro.

La méthode d'AC a déjà été utilisée pour différentes applications mathématiques et mécaniques. En effet, l'AC est une méthode idéale pour modéliser des phénomènes complexes comme la recristallisation, car grâce à sa flexibilité, elle permet d'incorporer les complexités d'un phénomène dans un algorithme rigoureux et simple. Vichniac (Vichniac, 1984) montre que la méthode des AC est une bonne candidate pour modéliser des phénomènes physiques, car elle peut être utilisée comme un outil numérique de calcul, un système dynamique ou bien un modèle original comparable avec d'autres méthodes de simulation.

Montheillet (Montheillet, 1996) a proposé un modèle mathématique basé sur la méthode AC pour prédire le comportement mécanique des matériaux hétérogènes. Dans ce modèle, Montheillet, modélise un agrégat polycristallin biphasé soumis à une déformation plane. Ce modèle prend en compte l'effet de la taille de grains ainsi que l'écroutissage et l'adoucissement morphologique. Les résultats de Montheillet sont comparables à ceux du modèle classique auto-cohérent. Plus tard, Montheillet a développé son modèle pour des matériaux biphasés (Montheillet, 2004). Ce modèle semble très intéressant pour modéliser le comportement des alliages de titane biphasés ( $\alpha+\beta$ ).

Ding (Ding, 2002) a modélisé la recristallisation d'une microstructure d'un alliage de titane dans un processus de déformation plastique à chaud. Le modèle de Ding essaye de prédire

l'amorçage et le grossissement des grains à différentes étapes d'évolution de la microstructure. Ding n'est pas le seul à utiliser l'AC pour modéliser la recristallisation. Miodownik (Miodownik, 2002) aussi a utilisé cette approche pour modéliser la recristallisation d'une microstructure d'alliages d'aluminium.

Baxter (Baxter, 2004) a modélisé l'écroissage anisotrope et l'effet Bauschinger par l'AC rectangulaire ayant 400 cellules. Yazdipour (Yazdipour, 2008) aussi a développé un modèle, en utilisant l'AC, pour simuler la recristallisation dynamique d'une microstructure d'un acier austénitique inoxydable dans un processus thermomécanique. Le modèle de Yazdipour, prend en compte la taille initiale des grains, les orientations cristallographiques des grains ainsi que la densité de dislocations. Les résultats obtenus par les deux modèles de Ding et Yazdipour sont en accord avec les résultats expérimentaux.

Zhan (Zhan X., 2008) a proposé un modèle d'automates cellulaires 2D pour modéliser le grossissement des grains avec des orientations cristallographiques aléatoires lors d'un procédé de solidification. Janssens (Janssens, 2009) a développé un modèle basé sur l'AC pour simuler le mouvement des joints de grains dans une microstructure. D'autres types de modèle comme ceux de Janssens ont été développés par d'autres chercheurs.

Boutana (Boutana, 2009) a modélisé le comportement microstructural des alliages de titane en dwell fatigue par la méthode des automates cellulaires. Pour atteindre cet objectif, Boutana a développé un modèle des automates cellulaires rectangulaire avec 900 cellules. Son modèle a été basé sur la solution de l'inclusion d'Eshelby et le chargement de dwell-fatigue est décomposé en trois étapes : charge, maintien en charge et retour élastique. La charge est caractérisée par une contrainte imposée macroscopiquement et le maintien en charge est modélisé par un chargement en fluage. L'anisotropie élastique du comportement dans le modèle de Boutana est intégrée en associant aux cellules, des modules d'élasticité en fonction de l'angle  $\theta$  entre l'axe «  $c$  » de la maille hexagonale et la direction du chargement. Boutana décrit le fluage par une équation de type Hollomon. Cette équation n'est pas adaptée pour décrire le fluage à l'échelle microscopique. Le présent travail de doctorat se base sur ces



travaux, cependant, les modèles développés dans cette étude sont plus adaptés et plus réalistes. Dans cette étude, l'anisotropie élastique de la maille hexagonale est modélisée par des orientations cristallographiques et chaque cellule est attribuée un tenseur de rigidité élastique isotrope transverse. Une règle de transition d'échelle plus adaptée, basée sur la solution d'Eshelby, est utilisée. Ainsi, une loi de fluage basée sur le cisaillement plastique est utilisée afin de modéliser le fluage à l'échelle microscopique. L'analyse de résultats, dans cette étude, ont été faites en fonction des orientations cristallographiques et pas en fonction des modules d'élasticité comme dans l'étude de Boutana. Finalement, dans ce travail de recherche, les modèles AC en élasticité et en élastoplasticité sont validés par une approche ÉF.

Dans la présente étude, cette revue de littérature servira à développer et traiter différents aspects des modèles d'AC : 1) la modélisation des microstructures d'alliages de titane : ces microstructures sont modélisées de telle façon qu'elles soient proches des microstructures réelles présentées dans la revue de littérature en terme de leurs caractéristiques cristallographiques et métallurgiques. 2) l'utilisation d'une règle de transition d'échelle basée sur la solution d'Eshelby. 3) l'utilisation de la méthode des automates cellulaires et la notion de voisinage. 4) la validation des modèles d'AC par un modèle ÉF des agrégats polycristallins. 5) l'identification des cellules critiques et les sites préférentiels d'amorçage de fissure selon les mécanismes d'endommagement discutés dans ce chapitre.



## CHAPITRE 2

### MODÈLE DES AUTOMATES CELLULAIRES : IMPLÉMENTATION ET ÉVALUATION

Un modèle numérique de simulation mécanique basé sur la méthode des automates cellulaires (AC) est développé dans cette étude. La présentation du modèle et la confrontation de l'approche proposée avec des calculs par la méthode des éléments finis sont les objectifs principaux de ce chapitre.

Plus précisément, les étapes de génération d'une microstructure virtuelle en utilisant les AC sont présentées. Ces étapes définissent un automate cellulaire comprenant un certain nombre de cellules et les propriétés cristallographiques et mécaniques des cellules. Une loi de plasticité avec un écrouissage linéaire est développée, afin de modéliser le comportement plastique des cellules.

Pour calculer les champs de contrainte et de déformation des cellules à partir d'un chargement à l'échelle macroscopique, une règle de transition d'échelle est développée en se basant sur la théorie d'Eshelby (Eshelby, 1957). Cette règle permet de définir trois approches de localisation permettant le passage de l'échelle macroscopique à l'échelle des cellules.

Finalement, les résultats obtenus par ce modèle en élasticité et en élastoplasticité sous chargement monotone sont comparés avec des calculs en champs complets réalisés par éléments finis sur des agrégats. Ces résultats permettent de préciser les limites de l'approche développée par les AC et les hypothèses considérées dans ce travail.

#### **2.1 Génération d'une microstructure virtuelle pour alimenter les automates cellulaires**

Le premier volet de développement du modèle est la génération d'une microstructure virtuelle. Pour cela, en utilisant le logiciel MATLAB®, des microstructures avec un certain

nombre de cellules (ex. 10000 cellules) sont générées et servent de base aux AC. Comme dans le présent travail on cherche à simuler le comportement d'un polycristal, chaque cellule représente un grain du polycristal.

### **2.1.1 Définition d'un automate cellulaire et des relations de voisinage entre cellules**

Pour modéliser une microstructure, un automate cellulaire contenant un nombre défini de cellules est généré. Chaque cellule est supposée ici représenter un grain métallurgique d'une microstructure réelle. Dans le cas des alliages de titane  $\alpha/\beta$  étudiés plus loin, une cellule sera associée à un grain  $\alpha_p$ . Pour construire numériquement cet automate cellulaire, des points représentant les centres des cellules sont générés. Les coordonnées de ces points  $(i,j)$  représentent les centres des cellules et sont utilisées pour localiser chaque cellule et définir ses relations de voisinage. D'un point de vue 2D, chaque grain dans une microstructure réelle est entouré en moyenne par 6 grains (Montheillet, 1996). En suivant cette hypothèse, les microstructures générées dans cette étude sont construites d'un pavage hexagonal régulier et chaque cellule dans la microstructure virtuelle possède 6 voisins immédiats. De plus, il n'est pas nécessaire d'avoir 6 voisins dans un AC et des relations de voisinage plus élaborées peuvent être définies.

Il faut noter que la taille des cellules n'est aucunement définie dans ce travail et les cellules sont supposées sphériques. La forme hexagonale de chaque cellule est une simple façon visuelle de montrer une cellule et son voisinage. La Figure 2-1 illustre un exemple d'un automate cellulaire (microstructure virtuelle) de 900 cellules.

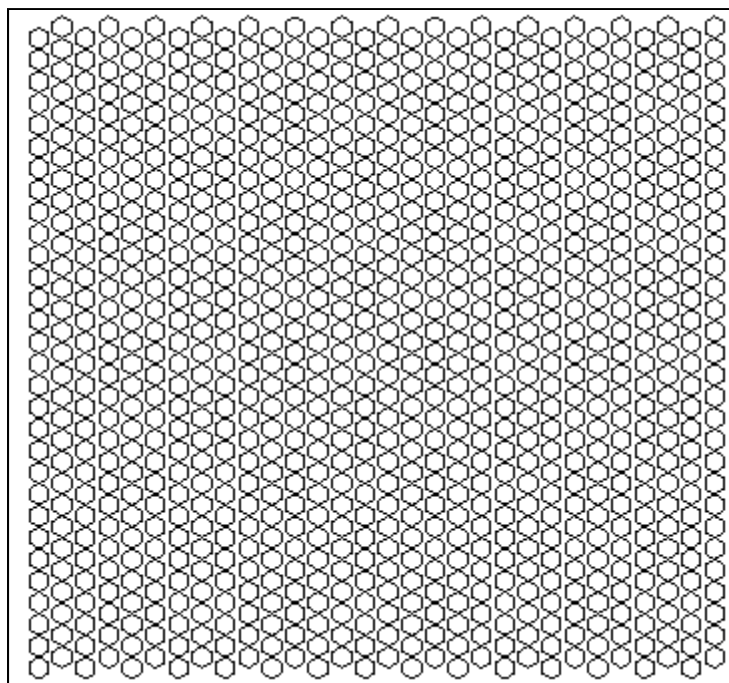


Figure 2-1 Exemple d'une microstructure virtuelle de 900 cellules générées par la méthode des automates cellulaires

Dans un automate cellulaire, les cellules situées à l'extrémité de l'automate n'ont pas le bon nombre de voisins immédiats. Pour résoudre ce problème, une condition périodique est imposée. Dans le cas de la présente étude, cette condition relie les cellules situées au bord de sorte que toutes les cellules aient 6 voisins immédiats. La Figure 2-2 montre un exemple de l'application de cette condition périodique pour définir les 6 voisins des cellules situées au bord d'un AC (illustré par  $8 \times 8$  cellules). Il faut noter que la Figure 2-1 et la Figure 2-2 sont des exemples de visualisations d'un automate et l'automate est en 3D et il se referme sur lui-même pour former un toroïde.

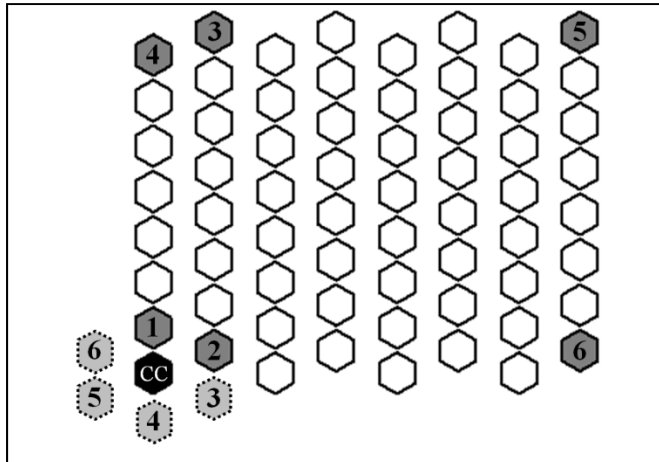


Figure 2-2 Exemple de conditions périodiques imposées aux extrémités d'un automate cellulaire

### 2.1.2 Attribution d'une orientation cristallographique à chaque cellule

Dans des microstructures réelles, chaque grain est caractérisé par une orientation cristallographique par rapport au repère de la pièce ou de l'échantillon. Plusieurs conventions existent pour définir les orientations cristallographiques (ex. angles d'Euler, espace de Rodrigues, etc.). La distribution statistique de ces orientations cristallographiques locales est traduite par la texture d'une microstructure.

Supposons que le repère orthonormé  $(e_1^{ref}, e_2^{ref}, e_3^{ref})$  soit le repère macroscopique. La Figure 2-3 montre le placement du repère  $(e_1^C, e_2^C, e_3^C)$  du cristal HCP de la phase  $\alpha$  des alliages de titane par rapport au repère macroscopique.

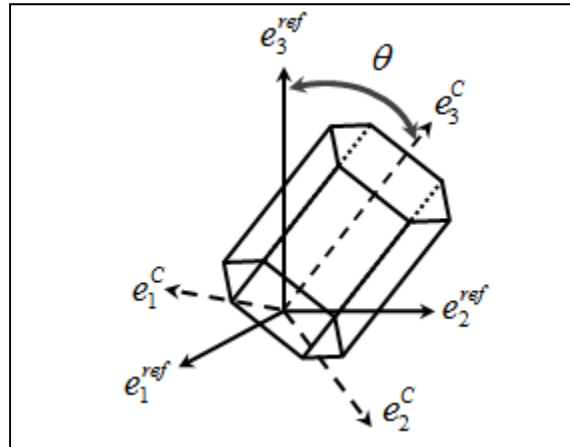


Figure 2-3 Repère macroscopique et repère d'un cristal HCP

Le passage entre le repère macroscopique et le repère du cristal peut être exprimé par les trois angles d'Euler  $\varphi_1, \phi, \varphi_2$ . Selon la convention de Bunge, l'angle  $\varphi_1$  correspond à une rotation autour de l'axe  $e_3^{ref}$  suivie par la rotation  $\phi$  autour de l'axe  $e_1^{ref}$  issu de la première rotation et finalement une dernière rotation  $\varphi_2$  autour de l'axe  $e_3^{ref}$  issu de la deuxième rotation (Figure 2-4).

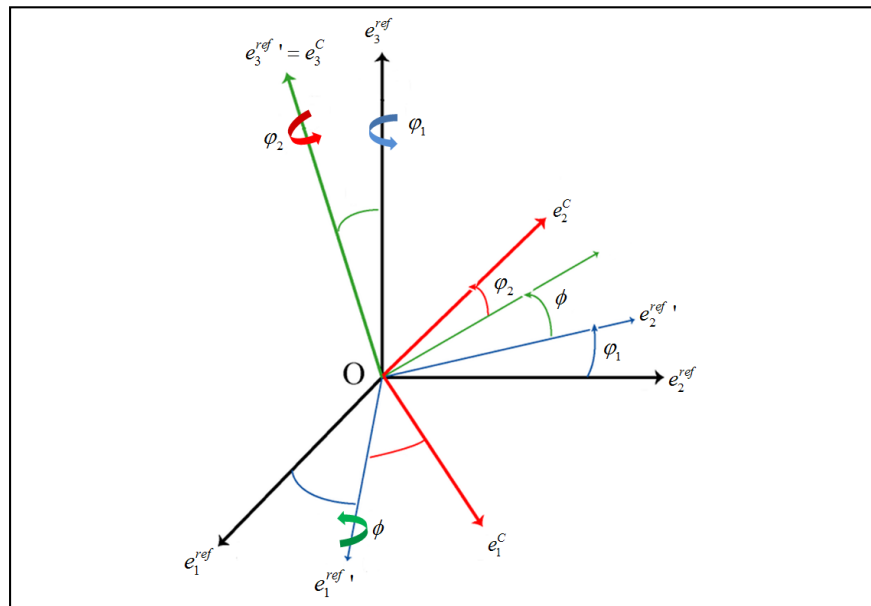


Figure 2-4 Trois angles d'Euler selon la convention de Bunge

Les symétries cristallines limitent les variations de ces angles comme  $0^\circ \leq \varphi_1, \varphi_2 \leq 360^\circ$  et  $0^\circ \leq \phi \leq 180^\circ$  dans l'espace d'Euler (Engler, 2010).

Pour mieux présenter le changement de repère d'une cellule par rapport au repère macroscopique, une matrice de rotation peut être définie. Cette matrice de rotation  $G^C$  s'obtient pour chaque cristal en fonction de ses angles d'Euler comme :

$$G^C = \begin{pmatrix} e_1^{ref} & e_2^{ref} & e_3^{ref} \\ \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \phi & \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 + \sin \varphi_2 \cos \varphi_1 \cos \phi & \sin \varphi_2 \sin \phi \\ -\sin \varphi_2 \cos \varphi_1 - \cos \varphi_2 \sin \varphi_1 \cos \phi & -\sin \varphi_1 \sin \varphi_2 + \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \phi & \cos \varphi_2 \sin \phi \\ \sin \varphi_1 \sin \phi & -\cos \varphi_1 \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_1^c \\ e_2^c \\ e_3^c \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

Pour chaque cellule, une orientation cristallographique peut être générée en utilisant les trois angles d'Euler en convention de Bunge  $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ . L'ensemble des orientations associées caractérisera la texture de la microstructure virtuelle. Dans cette étude, des microstructures sans orientation préférentielle (non texturées) sont générées. Cela nécessite que la distribution en orientations cristallographiques des microstructures soit aléatoire.

Les équations suivantes ont été utilisées pour générer les trois angles d'Euler de chaque cellule afin que la texture globale de l'AC soit le plus aléatoire possible.

$$\varphi_1 = 360x \quad \text{et} \quad 0^\circ \leq \varphi_1 \leq 360^\circ \quad (2.2)$$

$$\cos \phi = 2x - 1 \quad \text{et} \quad 0^\circ \leq \phi \leq 180^\circ \quad (2.3)$$

$$\varphi_2 = 360x \quad \text{et} \quad 0^\circ \leq \varphi_2 \leq 360^\circ \quad (2.4)$$

où  $x$  est une valeur aléatoire uniformément distribuée entre zéro et un ( $0 \leq x \leq 1$ ) et tirée pour chaque angle d'Euler.

Dans ce travail, la sollicitation macroscopique imposée est une charge uniaxiale selon la



direction  $e_3^{ref}$  du repère macroscopique. Par conséquent, identifier l'orientation de chaque cellule par rapport cet axe de chargement est essentiel. Dans le même contexte, un angle appelé «  $\theta$  » entre l'axe «  $c$  » de la maille hexagonale et la direction du chargement est calculé pour chaque cellule (Figure 2-3).

Pour un chargement uniaxial suivant la direction  $\vec{V}$  le vecteur de chargement peut être décrit comme  $\vec{V} = [V_1, V_2, V_3]^{ref}$ . Donc, l'angle  $\theta$  entre l'axe  $c$  d'une cellule et la direction du chargement se calcule en fonction de la matrice de rotation (Engler, 2010) :

$$\theta = \cos^{-1}(G^C \cdot \vec{V})_{33} \quad (2.5)$$

$$G^C \cdot \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_1(\cos \varphi_1 \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \phi) + V_2(\sin \varphi_1 \cos \varphi_2 + \sin \varphi_2 \cos \varphi_1 \cos \phi) + V_3(\sin \varphi_2 \sin \phi) \\ V_1(-\sin \varphi_2 \cos \varphi_1 - \cos \varphi_2 \sin \varphi_1 \cos \phi) + V_2(-\sin \varphi_1 \sin \varphi_2 + \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \phi) + V_3(\cos \varphi_2 \sin \phi) \\ V_1(\sin \varphi_1 \sin \phi) + V_2(-\cos \varphi_1 \sin \phi) + V_3(\cos \phi) \end{pmatrix}$$

Dans cette étude, la direction de chargement  $\vec{V} = e_3^{ref} = [0, 0, 1]^{ref}$  est un cas particulier qui conduit à  $\theta = \phi$ .

La Figure 2-5 montre la position de l'axe  $e_3^{ref}$  des cellules dans le triangle standard d'une microstructure non texturée générée par cette méthode.

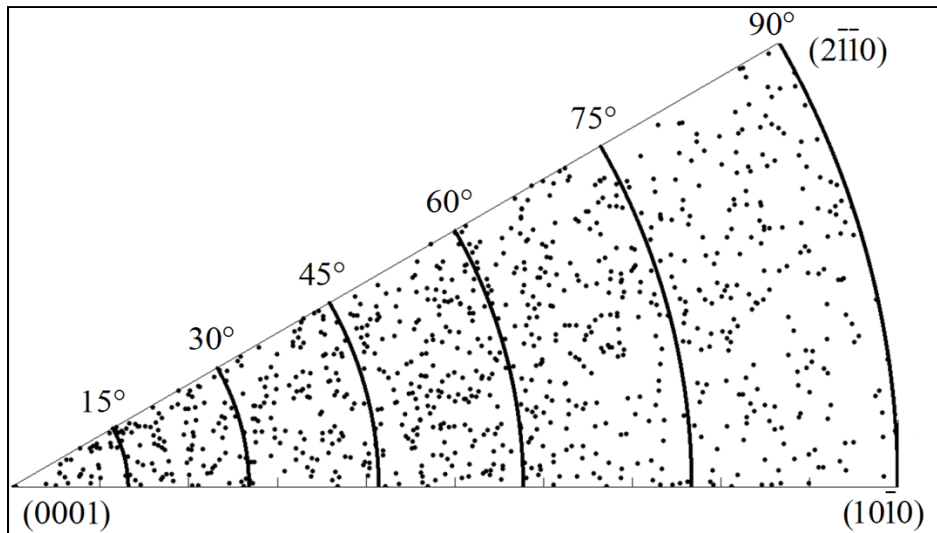


Figure 2-5 Figure de pôles inverse selon  $e_3^{ref}$  avec la projection stéréographique des 900 orientations d'une microstructure non texturée

## 2.2 Propriétés et loi de comportement en élasticité

Les propriétés mécaniques des cellules peuvent être définies grâce à l'orientation cristallographique. Les constantes élastiques de chaque cellule sont calculées. La phase  $\alpha$  HCP des alliages de titane simulée dans cette étude présente un comportement élastique anisotrope. Cependant, comme décrite plus loin, la loi de transition d'échelle adoptée dans ce travail suppose l'isotropie des propriétés des cellules. Ainsi, ce sont des rigidités isotropes (module d'élasticité, de compressibilité, de cisaillement et le coefficient de Poisson) de la direction  $e_3^{ref}$  qui sont calculées pour chaque cellule à partir des constantes élastiques anisotropes.

### 2.2.1 Propriétés élastiques de chaque cellule en fonction de son orientation cristalline

Le matériau modélisé dans cette étude est un alliage de titane Ti-6Al-4V. Le tenseur d'élasticité isotrope transverse d'un cristal hexagonal de cet alliage dans le repère du cristal s'écrit en notation de Voigt (Voigt, 1928) :

$$C^C = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

où  $c_{66} = 1/2(c_{11} - c_{12})$ . Le Tableau 2.1 donne les propriétés élastiques d'un cristal HCP d'un alliage de titane Ti-6Al-4V à température ambiante.

Tableau 2.1 Propriétés élastiques d'un cristal HCP de titane (Fisher, 1964)

<b>Propriétés élastiques du matériau étudié (GPa)</b>	$C_{11}$	162,4
	$C_{12}$	92
	$C_{13}$	69
	$C_{33}$	180,7
	$C_{44}$	46,7

Pour calculer les constantes élastiques de chaque cellule, il faut écrire le tenseur d'élasticité  $C^C$  dans le repère macroscopique. Pour cela la matrice de rotation  $G^C$  (2.1) est utilisée. Cette matrice de rotation permet l'expression du tenseur d'élasticité  $C^C$  dans un repère quelconque caractérisé par les trois angles d'Euler. En conséquence, le tenseur d'élasticité de chaque cellule s'obtient par définition selon (Kocks, 1998) :

$$C_{i'j'l'k'}^{ref} = G_{ii'}^C G_{jj'}^C G_{kk'}^C G_{ll'}^C C_{ijkl}^C \quad (2.7)$$

### 2.2.1.1 Module d'élasticité $E$ de chaque cellule en fonction de son orientation cristallographique

Pour cela, le tenseur d'élasticité  $C^{ref}$  de chaque cellule calculé avec sa matrice de rotation est utilisé (équation (2.7)). Ensuite, le tenseur de souplesse  $S^{ref}$  de chaque cellule est calculé :

$$S^{ref} = (C^{ref})^{-1} \quad (2.8)$$

Le module de Young des cellules suivant la direction de chargement  $\vec{V} = [V_1, V_2, V_3]^{ref}$  s'extrait par l'équation suivante (Tromans, 2011) :

$$E^C = (S_{3333}^{ref})^{-1} \quad (2.9)$$

Les modules de Young des cellules changent en fonction de leurs orientations cristallographiques et leurs valeurs sont fortement hétérogènes. La dépendance du module de Young  $E^C$  à l'angle  $\theta$  est une façon d'intégrer l'hétérogénéité de comportement et sera utilisée dans cette étude.

La Figure 2-6 montre la courbe de distribution des modules de Young d'une microstructure virtuelle de 900 cellules en fonction des angles  $\theta$ . On note que les modules d'élasticité des cellules suivant la direction  $[0,0,1]$  varient entre 144 GPa pour une orientation raide ( $\theta=0^\circ$ ) et 104 GPa pour une orientation souple ( $\theta=90^\circ$ ). Cette courbe est en accord avec la courbe expérimentale de (Fisher, 1964) présentée dans la Figure 1-12. Sur cette courbe on note aussi que dans le cas d'une microstructure non texturée, le nombre de cellules ayant des angles  $\theta$  faibles (modules d'élasticité élevés) est inférieur de nombre de cellules avec des angles  $\theta$  élevés (modules d'élasticité faibles).

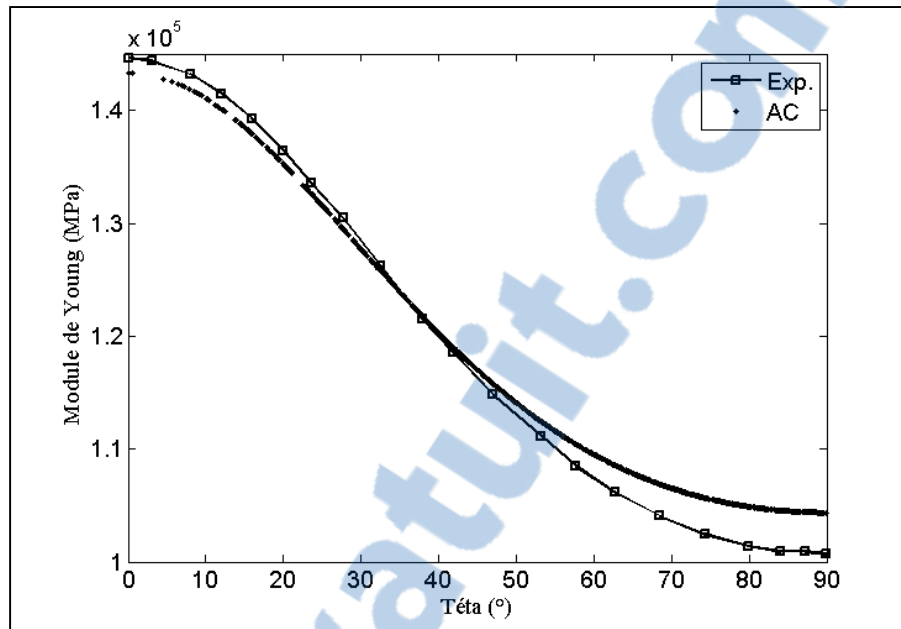


Figure 2-6 Comparaison de distribution des modules d'élasticité en fonction des angles  $\theta$  entre les résultats expérimentaux et d'une microstructure de 900 cellules en AC

Dans cette étude, on suppose que les modules d'élasticité des cellules restent constants au cours du chargement, car les déformations restent faibles. Il est essentiel de noter dès maintenant que l'anisotropie du comportement de chaque cellule n'est pas retranscrite dans ce travail.

### 2.2.1.2 Coefficient de Poisson, module de compressibilité $k$ et de cisaillement $\mu$

Le comportement des grains est complexe à cause de l'anisotropie locale. Dans cette étape de modélisation, pour rendre le comportement des cellules isotrope on suppose que le coefficient de Poisson  $\nu$  est constant pour toutes les cellules. Cette hypothèse est une base importante du modèle d'AC développé dans ce travail. La valeur de coefficient de Poisson est choisie égale à sa valeur macroscopique. Les détails du calcul du coefficient de Poisson macroscopique sont présentés plus loin dans la section 2.2.2. En prenant cette hypothèse, les

modules de compressibilité  $k^C$  et de cisaillement  $\mu^C$  des cellules se calculent en élasticité en fonction des modules de Young  $E^C$  comme :

$$k^C = \frac{E^C}{3(1-2\nu)} \quad (2.10)$$
$$\mu^C = \frac{E^C}{2(1+\nu)}$$

Cette solution conduit à des valeurs des modules de compressibilité et de cisaillement hétérogènes qui dépendent de l'orientation cristallographique des cellules via leur module de Young.

### **2.2.2 Rigidité globale de l'automate cellulaire : cas du comportement macroscopique isotrope en élasticité**

Pour calculer les propriétés mécaniques macroscopiques de l'automate, on suppose également un comportement élastique isotrope, qui est ici justifié par une texture à priori isotrope du polycristal simulé. Cela permet de calculer les propriétés mécaniques d'un ensemble de cristaux hexagonaux et d'une microstructure virtuelle à l'échelle macroscopique.

En élasticité isotrope, le tenseur d'élasticité peut être divisé en deux, une partie déviatorique et une partie hydrostatique :

$$C = 2\mu J + 3kK \quad (2.11)$$

où  $\mu$  est le module de cisaillement,  $k$  est le module de compressibilité et les matrices  $K$  et  $J$  (tenseurs d'ordre 4) se définissent en notation de Kelvin comme :

$$\mathbf{K} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{J} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

où

$$\mathbf{J} + \mathbf{K} = \mathbf{I} \quad (2.13)$$

Les modules de compressibilité et de cisaillement isotropes d'un tenseur d'élasticité quelconque  $\mathbf{C}$  peuvent être définis par :

$$k = \frac{1}{3}(\mathbf{C} :: \mathbf{K}) \quad (2.14)$$

$$\mu = \frac{1}{10}(\mathbf{C} :: \mathbf{J}^{Voigt}) \quad (2.15)$$

où  $::$  est le produit scalaire des tenseurs d'ordre 4. Afin de pouvoir calculer le module de cisaillement macroscopique, la matrice  $\mathbf{J}$  est écrite en notation de Voigt comme suit :

$$\mathbf{J}^{Voigt} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 \end{bmatrix} \quad (2.16)$$

Le coefficient de Poisson  $\nu$  et le module de Young  $E$  s'obtiennent respectivement par les relations classiques :

$$\nu = \frac{3k - 2\mu}{6k + 2\mu} \quad (2.17)$$

$$E = 2\mu(1 + \nu) \quad (2.18)$$

Pour une microstructure virtuelle générée par les AC, le tenseur d'élasticité macroscopique peut être calculé comme la moyenne du tenseur d'élasticité de toutes les cellules comme :

$$\mathbf{C}^{Macro} = \frac{1}{N^C} \sum_1^{N^C} \mathbf{C}^{ref} \quad (2.19)$$

où  $N^C$  est le nombre des cellules de la microstructure. Dans cette étude, les propriétés élastiques macroscopiques sont calculées en utilisant ce tenseur  $\mathbf{C}^{Macro}$ . Donc, les modules de cisaillement et de compressibilité de la microstructure s'obtiennent respectivement par les équations (2.14) et (2.15) et le coefficient de Poisson  $\nu$  et le module d'élasticité  $E^{Macro}$  se calculent par les équations (2.17) et (2.18). Les valeurs des propriétés élastiques macroscopiques ( $k$ ,  $\mu$ ,  $\nu$  et  $E$ ) restent constantes quel que soit la microstructure, car les matrices J et K sont indépendantes de la base. Donc :

$$\nu = 0,3193 \quad (2.20)$$

$$E^{Macro} = 116,3 \text{ GPa} \quad (2.21)$$

Cependant, le module de Young macroscopique peut être aussi calculé par l'équation (2.9) en utilisant le tenseur de souplesse macroscopique  $\mathbf{S}^{Macro} = (\mathbf{C}^{Macro})^{-1}$ . Cela conduit à des valeurs de module de Young macroscopique varié. La manière dont le module d'élasticité macroscopique est calculé influence très faiblement le comportement microscopique.



### 2.2.3 Validation d'une distribution d'orientations aléatoires

Pour assurer que la microstructure générée par l'AC est non texturée, il faut assurer que le tirage des orientations cristallographiques est aléatoire. Dans cette étude, deux méthodes sont utilisées pour vérifier le tirage aléatoire des orientations. La première méthode consiste à vérifier le tenseur d'élasticité macroscopique de la microstructure. Le tenseur de  $C^{Macro}$  d'un automate de 900 cellules avec une distribution des orientations aléatoire est de la forme :

$$C^{Macro} = \begin{bmatrix} 165,8 & 78,3 & 77,7 & -0,6 & -0,6 & 0,1 \\ 78,3 & 165,8 & 77,5 & 0,3 & 1,5 & -0,3 \\ 77,7 & 77,5 & 166,4 & 0,2 & -0,7 & 0,4 \\ -0,6 & 0,3 & 0,1 & 44,2 & -0,7 & -0,5 \\ -0,6 & 1,5 & -0,6 & -0,6 & 44,2 & 0,2 \\ 0,1 & -0,3 & 0,4 & -0,6 & 0,2 & 43,8 \end{bmatrix} (GPa) \quad (2.22)$$

On note que ce tenseur d'élasticité moyen de toutes les cellules tend vers un tenseur d'élasticité isotrope de la forme  $2\mu J + 3kK$ . Cela démontre que les orientations cristallographiques des microstructures générées par le modèle des AC sont bien aléatoires. Les composantes nulles dans le tenseur d'élasticité isotrope transverse (2.6) ne sont pas nulles dans le tenseur  $C^{Macro}$  car la microstructure modélisée ne contient pas un nombre représentatif (d'une microstructure) des cellules. Plus le nombre des cellules modélisées est grand, plus ces composantes tendent vers zéro.

La deuxième méthode correspond à caractériser la microstructure par une matrice de Kearns globale. La matrice de Kearns est une matrice géométrique qui permet de mieux connaître la texture d'une microstructure (voir ANNEXE III). Dans cette étude, la matrice de Kearns globale est calculée comme la moyenne des matrices de Kearns de toutes les cellules. Pour chaque cellule, la matrice de Kearns est calculée comme  $\underline{\underline{K}} = \langle \vec{c} \otimes \vec{c} \rangle$ , où  $\vec{c}$  est un vecteur obtenu par l'expression de l'axe  $\vec{c}$  d'une cellule dans le repère macroscopique. Les composantes de la matrice de Kearns varient entre 0 et 1 représentant des textures souple et

rigide respectivement. Pour une texture parfaitement isotrope, les composantes diagonales sont égales à 1/3 et les autres composantes sont nulles. La matrice de Kearns d'un automate de 900 cellules avec une distribution en orientations aléatoires est :

$$\underline{\underline{K}}^{Macro} = \frac{1}{N^C} \sum_1^{N^C} \underline{\underline{K}}^C = \begin{bmatrix} 0,3367 & -0,0013 & 0,0065 \\ -0,0013 & 0,3414 & 0,0197 \\ 0,0065 & 0,0197 & 0,3218 \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

On constate que les composantes diagonales de la matrice de Kearns sont très proches à 1/3. Par ces deux méthodes de vérification, on s'assure que les microstructures générées par l'AC sont isotropes et non texturées.

## 2.3 Règle de transition d'échelle et localisation de la déformation

La charge macroscopique imposée sur des microstructures virtuelles modélisées dans cette étude est connue. Cette charge doit être transférée dans les cellules afin de déterminer les champs de contrainte et de déformation locaux. Pour cela, une règle de transition d'échelle basée sur la théorie d'Eshelby est utilisée et adaptée à la méthode de l'automate cellulaire afin de permettre le passage de l'échelle macroscopique à l'échelle des cellules.

### 2.3.1 Règle de transition d'échelle en élasticité

La règle de transition d'échelle basée sur la solution d'Eshelby permet le passage macro-micro et donne des estimations sur les contraintes et les déformations des grains d'une microstructure en fonction de leur orientation cristallographique et celles de leur voisinage. Avant d'expliquer cette règle, un rappel sur la solution d'Eshelby est donné.

#### **Solution d'Eshelby pour le problème de l'inclusion hétérogène :**

Eshelby (Eshelby, 1957) a proposé une solution pour estimer les champs de contrainte et de

déformation dans une inclusion ellipsoïdale plongée dans une matrice chargée à l'infini. La solution d'Eshelby est basée sur deux hypothèses principales; 1) le chargement est appliqué à l'infini et 2) l'inclusion et la matrice ont des comportements élastiques linéaires. Selon la solution d'Eshelby, la déformation dans l'inclusion  $\underline{\underline{\varepsilon}}^I$  est liée à la déformation macroscopique imposée sur la matrice  $\underline{\underline{E}}^0$  via un tenseur de localisation  $A_{Esh}$  :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^I = A_{Esh} : \underline{\underline{E}}^0 \quad (2.24)$$

Le tenseur de localisation  $A_{Esh}(S_{Esh}^0, C^0, C^I)$  est fonction des tenseurs d'élasticité de la matrice et de l'inclusion et dépend à la forme de l'inclusion par le tenseur d'Eshelby.

Dans cette étude, la règle de transition d'échelle est adaptée à partir de la solution d'Eshelby pour une inclusion hétérogène non chargée, entourée par une matrice chargée à l'infini. La solution d'Eshelby pour ce cas est présentée dans le premier chapitre (section 1.5.2) :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^I = \left[ \mathbf{I} + S_{Esh}^0 : (C^0)^{-1} : (C^I - C^0) \right]^{-1} : \underline{\underline{E}}^0 \quad (2.25)$$

Les tenseurs d'élasticité dans cette solution peuvent être anisotropes. L'estimation des champs locaux dans l'inclusion est complexe si les comportements sont anisotropes. Dans cette étude, pour obtenir une règle de transition d'échelle, on se place dans le cas d'élasticité isotrope et d'une inclusion sphérique. Le tenseur d'Eshelby s'écrit (Mura, 1987) :

$$S_{Esh}^0 = \beta^0 \mathbf{J} + \alpha^0 \mathbf{K} \quad (2.26)$$

où  $\nu^0$  est le coefficient de Poisson de la matrice et  $\alpha^0$  et  $\beta^0$  s'obtiennent comme :

$$\beta^0 = \frac{2}{15} \frac{(4-5\nu^0)}{(1-\nu^0)} \quad , \quad \alpha^0 = \frac{1}{3} \frac{(1+\nu^0)}{(1-\nu^0)} \quad (2.27)$$

Comme cela a été mentionné dans la section 2.2.1.2, le coefficient de Poisson est supposé constant pour toutes les cellules afin de remplacer le comportement local anisotrope par un comportement isotrope. Cela résulte que le tenseur d'Eshelby est homogène et identique pour toutes les cellules durant la localisation.

Les tenseurs d'élasticité isotrope de l'inclusion  $C^I$  et de la matrice  $C^0$  s'écrivent respectivement comme :

$$C^I = 2\mu^I J + 3k^I K \quad (2.28)$$

$$C^0 = 2\mu^0 J + 3k^0 K \quad (2.29)$$

On remplaçant les équations (2.26), (2.28) et (2.29) dans l'équation (2.25), la déformation dans l'inclusion  $\underline{\underline{\varepsilon}}^I$  se calcule comme :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^I = \frac{\mu^0}{\mu^0(1-\beta^0) + \mu^I \beta^0} \underline{\underline{E}}^0_{dev} + \frac{1}{3} \frac{k^0}{k^0(1-\alpha^0) + k^I \alpha^0} Tr(\underline{\underline{E}}^0) : \underline{\underline{I}} \quad (2.30)$$

où  $k^I, \mu^I, k^0$  et  $\mu^0$  sont respectivement les modules de compressibilité et de cisaillement de l'inclusion et de la matrice.  $\underline{\underline{I}}$  est la matrice d'identité d'ordre 2 et la notation «  $Tr$  » signifie la trace d'un tenseur.

La matrice joue un rôle très important dans le calcul des champs locaux. Par exemple, si la matrice est considérée comme l'ensemble des grains, alors cela constitue un milieu homogène équivalent (MHE) et on retrouve la solution de l'approche Auto-Cohérente (François, 1991). Dans le cas particulier des automates cellulaires, un voisinage différent pour chaque cellule peut être défini comme matrice dans l'exploitation de la solution d'Eshelby. Plusieurs approches de localisation seront testées dans le présent travail.

### 2.3.2 Trois approches de localisation

Approche 1 : Cette approche consiste à localiser la charge imposée macroscopiquement à la microstructure dans les cellules en une seule étape. Chaque cellule est considérée comme une inclusion et la matrice est constituée de ses 6 cellules voisines. L'ensemble de ses six cellules voisines est alors considéré comme le milieu infini sur laquelle la charge macroscopique est imposée. La Figure 2-7 montre le schéma de cette approche.

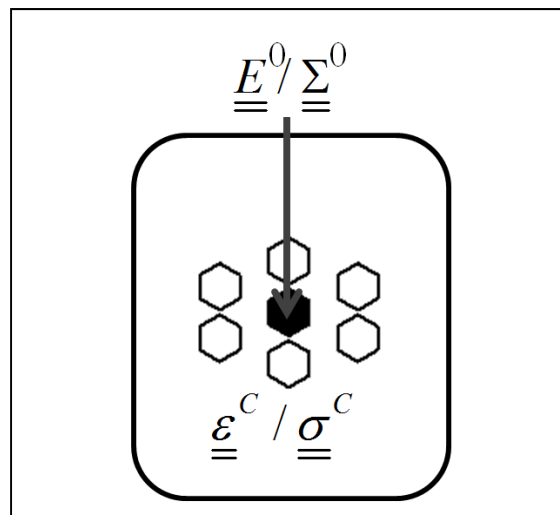


Figure 2-7 Schéma de localisation en une étape

Approche 2 : La deuxième approche propose deux étapes de localisation pour effectuer le passage macro-micro. Dans la première étape, l'ensemble cellule centrale et voisinage (1+6 cellules) est considéré comme une inclusion alors que les autres cellules constituent le milieu infini. Cela permet de localiser la charge à l'infini à l'ensemble de la cellule centrale et son voisinage. La Figure 2-8a illustre cette première étape. À la fin de la première étape, la déformation sur l'ensemble des 7 cellules est connue et la seconde localisation permet de calculer la déformation dans la cellule centrale (CC). Dans cette étape la cellule centrale est considérée comme l'inclusion et ses 6 voisins le milieu infini dans la théorie d'Eshelby. La Figure 2-8b illustre cette deuxième étape de localisation.

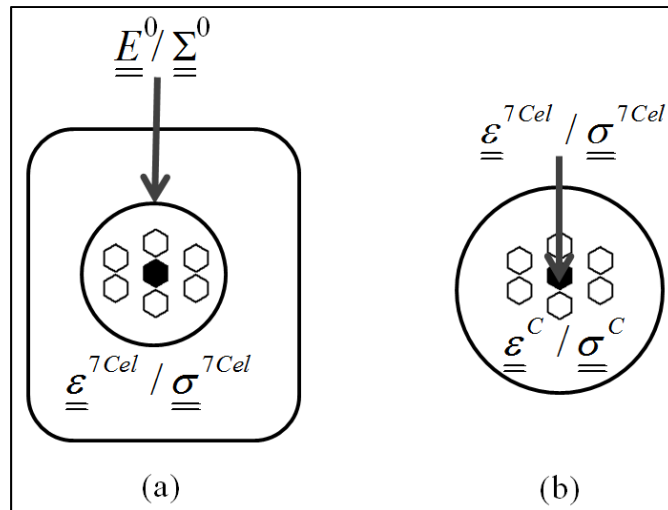


Figure 2-8 Localisation en deux étapes  
 (a) étape 1: localisation de l'échelle macroscopique à l'ensemble de 7 cellules, (b) étape 2: localisation à partir de 7 cellules à la cellule centrale

Approche 3 : Cette approche est similaire à l'approche 2, mais avec cette différence que durant la première étape de localisation, les propriétés mécaniques de la cellule centrale ne seront pas prises en compte dans le calcul des propriétés de l'inclusion : l'inclusion de la première localisation est l'ensemble de 6 cellules voisines au lieu des 7 dans l'approche 2.

Le Tableau 2.2 résume ces trois approches et les hypothèses pour l'inclusion et la matrice dans chaque approche.

Tableau 2.2 Description des trois approches de localisation (les indices 1 et 2 du tenseur de localisation  $A_{Esh}$  indiquent le numéro de l'étape de localisation)

Approche	Étape 1		Étape 2		Localisation
	Matrice	Inclusion	Matrice	Inclusion	
1	6 cellules voisines	Cellule centrale (CC)	-	-	$\underline{\underline{\varepsilon}}^c = A_{Esh} : \underline{\underline{E}}^0$
2	Toutes les cellules moins la CC et son voisinage	6 cellules voisines + Cellule centrale (CC)	6 cellules voisines	Cellule centrale (CC)	$\underline{\underline{\varepsilon}}^c = A_{Esh}^2 : (A_{Esh}^1 : \underline{\underline{E}}^0)$
3	Toutes les cellules moins la CC et son voisinage	6 cellules voisines	6 cellules voisines	Cellule centrale (CC)	$\underline{\underline{\varepsilon}}^c = A_{Esh}^2 : (A_{Esh}^1 : \underline{\underline{E}}^0)$

### 2.3.3 Calcul des propriétés élastiques associées au voisinage

Le comportement mécanique dans chaque cellule est supposé homogène. Ce comportement à l'instant  $t+\Delta t$  dépend du comportement de ses 6 voisins à l'instant  $t$ . La fonction de transition d'état proposée par Moore (Moore, 1962) a été conçue pour 8 cellules de voisinage (section 1.6.3). Dans cette étude, l'environnement de Moore est adapté pour utiliser un voisinage hexagonal. Cela permet de relier le comportement d'une cellule à ses 6 voisins dans l'automate cellulaire (Éq. (1.9)).

Puisque le voisinage joue un rôle important sur la réponse de la cellule centrale, le calcul des propriétés effectives du voisinage est une démarche très importante. Ces propriétés peuvent être calculées en se basant sur différentes hypothèses. Les hypothèses de Voigt et Reuss sont deux modèles simples connus qui ne font pas d'hypothèses sur la morphologie des phases étudiées et encadrent les solutions possibles pour le calcul de propriétés moyennes.

Approche de Voigt : la déformation est la même dans toutes les cellules. C'est-à-dire, la déformation dans chaque cellule est égale à la déformation macroscopique. Ce modèle donne une estimation par excès de la rigidité du matériau. Les propriétés effectives du voisinage sont calculées par :

$$k^{Voigt} = \frac{1}{N^C} \sum_1^{N^C} k^C \quad (2.31)$$

$$\mu^{Voigt} = \frac{1}{N^C} \sum_1^{N^C} \mu^C$$

où  $k^{Voigt}$  et  $\mu^{Voigt}$  sont les modules de compressibilité et de cisaillement estimés par l'hypothèse de Voigt pour  $N$  cellules.

Approche de Reuss : ce modèle se base sur l'uniformité de la contrainte et suppose que la contrainte dans chaque cellule est égale à la contrainte macroscopique. Le modèle de Reuss estime une rigidité plus faible que la réalité. Les modules de compressibilité et de cisaillement du milieu de voisinage de Reuss obtiennent comme :

$$\frac{1}{k^{Reuss}} = \frac{1}{N^C} \sum_1^{N^C} \frac{1}{k^C} \quad (2.32)$$

$$\frac{1}{\mu^{Reuss}} = \frac{1}{N^C} \sum_1^{N^C} \frac{1}{\mu^C}$$

où  $k^{Reuss}$  et  $\mu^{Reuss}$  sont les modules de compressibilité et de cisaillement estimés par l'hypothèse de Reuss.

Dans cette étude, le modèle de Voigt est utilisé pour calculer les propriétés effectives du milieu de voisinage de part de sa simplicité. Par ailleurs, des tests ont montré que l'utilisation du modèle de Reuss pour cette étape conduisait à des résultats similaires.



Dans le cas de l'approche 1, soit une localisation en seule étape, les propriétés effectives du voisinage  $k^V$  et  $\mu^V$  sont calculées comme la moyenne des propriétés des 6 cellules voisines (CV). C'est-à-dire :

$$\begin{aligned} k^V &= \frac{1}{6} \sum_1^6 k^{CV} \\ \mu^V &= \frac{1}{6} \sum_1^6 \mu^{CV} \end{aligned} \quad (2.33)$$

où l'indice « V » est utilisé pour indiquer les propriétés effectives d'un voisinage.

Dans le cas de l'approche 2, soit une localisation en deux étapes, les propriétés effectives de l'inclusion lors de la première localisation sont les moyennes des propriétés de ces 7 cellules (la cellule centrale (CC) et son voisinage) et les propriétés effectives du milieu du voisinage sont les moyennes des propriétés mécaniques des cellules restantes. Les équations suivantes montrent les calculs des propriétés mécaniques de l'inclusion et du voisinage respectivement.

$$\begin{aligned} k^I &= \frac{1}{7} \left( \sum_1^6 k^{CV} + k^{CC} \right) \\ \mu^I &= \frac{1}{7} \left( \sum_1^6 \mu^{CV} + \mu^{CC} \right) \end{aligned} \quad (2.34)$$

$$\begin{aligned} k^0 &= \frac{1}{N^C - 7} \left( \sum_1^{N^C} k^C - \sum_1^6 k^{CV} - k^{CC} \right) \\ \mu^0 &= \frac{1}{N^C - 7} \left( \sum_1^{N^C} \mu^C - \sum_1^6 \mu^{CV} - \mu^{CC} \right) \end{aligned} \quad (2.35)$$

En seconde étape, les propriétés mécaniques du milieu sont les moyennes des propriétés mécaniques de six cellules voisines et se calculent par l'équation (2.33).

Dans le cas de l'approche 3, la localisation en deux étapes se calcule comme pour l'approche

2 avec la différence qu'ici, les rigidités de la cellule centrale ne seront pas considérées pour le calcul d'inclusion :

$$k^{Inclusion} = \frac{1}{6} \sum_1^6 k^{CV} \quad (2.36)$$

$$\mu^{Inclusion} = \frac{1}{6} \sum_1^6 \mu^{CV}$$

### 2.3.4 Normalisation de la déformation

Dans une démarche d'homogénéisation, la moyenne des déformations locales doit être égale à la déformation macroscopique. C'est-à-dire pour  $N^C$  cellules :

$$\langle \underline{\underline{\varepsilon}}^C \rangle_{N^C} = \underline{\underline{E}}^0 \quad (2.37)$$

En effet, étant donné que dans cette étude, la localisation s'effectue en déformation, cette condition (2.37) doit être vérifiée. Pour cela, Montheillet (Montheillet, 1996) propose un facteur de normalisation scalaire constant multipliant la déformation macroscopique et indépendant de la cellule étudiée. Ici, une démarche similaire est adaptée.

En considérant un chargement en déformation qui reste diagonal, la localisation de déformation peut être écrite avec trois coefficients de normalisation scalaire  $h_1, h_2$  et  $h_3$  :

$$\varepsilon_{ii}^C = \langle h_i \rangle_{N^C} (A_{Esh} : \underline{\underline{E}}^0) :: N_{ii} \quad (2.38)$$

où  $N_{ii} = e_i \otimes e_i \otimes e_i \otimes e_i$  ( $\otimes$  est le produit dyadique)  $e$  est le vecteur de base et l'indice  $i$  vaut de 1 à 3. Avec l'hypothèse que  $\langle \varepsilon_{ii}^C \rangle = E_{ii}$  on déduit que :

$$h_i = \frac{\varepsilon_{ii}^C}{(A_{Esh} : \underline{\underline{E}}^0) :: N_{ii}} \quad (2.39)$$

Ces facteurs sont calculés pour chaque cellule et leurs moyennes sont intégrées dans le modèle par une itération de localisation.

#### 2.4 Confrontation des approches proposées avec des calculs d'agrégats par des éléments finis (ÉF)

À cette étape de l'étude, il est essentiel de valider des choix de modélisation pour des chargements simples en élasticité et plasticité avant de faire des simulations plus complexes (avec des chargements comme le dwell-fatigue). Cette confrontation entre résultats d'AC et le modèle des ÉF vise à atteindre trois objectifs :

- 1) Valider les formulations mathématiques et les hypothèses sur lesquelles ce modèle est basé;
- 2) Montrer que le modèle développé dans cette étude modélise le comportement mécanique des alliages de titane de façon réaliste et donne des résultats acceptables comparant avec les observations expérimentales et des modèles éléments finis (ÉF);
- 3) Choisir l'approche de localisation qui donne les résultats les plus acceptables parmi les trois approches présentées dans la section 2.3.1.

Pour cette confrontation, une collaboration avec Philippe Pilvin du Laboratoire d'Ingénierie des Matériaux de Bretagne (LIMATB) à l'Université de Bretagne-Sud (UBS) a été engagée. L'équipe « Comportement des Matériaux hétérogènes » du LIMATB met en œuvre des calculs en champ complet sur des polycristaux pour étalonner des approches multi-échelles. Ces calculs sont réalisés par ÉF sur des microstructures représentatives des matériaux. Les résultats obtenus par ces deux modèles sont comparés sous chargement élastique et élastoplastique.

### 2.4.1 Calculs en élasticité avec les AC

Pour ces calculs, un chargement uniaxial en contrainte est imposé macroscopiquement sur la microstructure. Ce chargement est localisé dans toutes les cellules par la règle de transition d'échelle (2.30) en appliquant une approche de localisation. À la fin du chargement, il est assuré que la moyenne des contraintes de toutes les cellules soit égale à la contrainte macroscopique.

Le chargement macroscopique appliqué sur la microstructure est simulé par un tenseur de contrainte imposée  $\underline{\underline{\Sigma}}^{imp}$ . Ce tenseur est défini par l'équation (2.40) afin de modéliser un chargement macroscopique uniaxial suivant la direction 3 du repère macroscopique ( $e_3^{ref}$ ).

$$\underline{\underline{\Sigma}}^{imp} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Sigma_{33} \end{bmatrix} \quad (2.40)$$

où  $\Sigma_{33}$  est la composante 33 du tenseur de contrainte  $\underline{\underline{\Sigma}}^{imp}$  dans la direction  $e_3^{ref}$ .

Le tenseur de déformation macroscopique  $\underline{\underline{E}}^0$  se calcule par la loi de Hooke à partir du ce tenseur de contrainte comme :

$$\underline{\underline{E}}^0 = \frac{1}{E^{Macro}} \left[ (1 + \nu) \underline{\underline{\Sigma}}^{imp} - \nu Tr(\underline{\underline{\Sigma}}^{imp}) \underline{\underline{I}} \right] \quad (2.41)$$

Le coefficient de Poisson  $\nu$  et le module d'élasticité macroscopique  $E^{Macro}$  sont calculés par les équations (2.20) et (2.21) respectivement.

Ce tenseur de déformation  $\underline{\underline{E}}^0$  se transfère dans les cellules par la règle de transition

d'échelle (équation (2.30)) et permet de calculer les tenseurs de déformation des cellules  $\underline{\underline{\varepsilon}}^C$ . À partir de cette valeur, le tenseur de contrainte de chaque cellule s'obtient par la loi de Hooke comme :

$$\underline{\underline{\sigma}}^C = 2\mu^C \underline{\underline{\varepsilon}}^C + (k^C - \frac{2\mu^C}{3})Tr(\underline{\underline{\varepsilon}}^C)\underline{\underline{I}} \quad (2.42)$$

La réponse en contrainte macroscopique de l'automate est calculée par la moyenne volumique des contraintes de toutes les cellules  $\langle \sigma_{33}^C \rangle_{N^C}$ . En effet, la règle de transition d'échelle qui transforme la contrainte macroscopique dans les cellules donne une estimation des contraintes locales. Donc, la moyenne de contraintes de toutes les cellules, qui représente la contrainte macroscopique, n'est pas nécessairement égale à la contrainte imposée. C'est pourquoi le pilotage en chargement se fait en établissant une consigne  $\Sigma^0$ . Cette consigne représente le niveau de contrainte voulue à l'échelle macroscopique. À la fin du chargement, la moyenne de contrainte de toutes les cellules doit être égale à cette consigne. Pour cela une condition de vérification est définie comme :

$$\langle \sigma_{33}^C \rangle_{N^C} = \Sigma^0 \quad (2.43)$$

Puisque le calcul est élastique, cette condition peut être satisfaite en imposant la contrainte macroscopique en deux incréments. Une contrainte macroscopique est imposée. À la fin de cet incrément, la moyenne des contraintes de toutes les cellules est calculée et elle diffère de la consigne. Le second incrément consiste donc à multiplier la contrainte macroscopique par un coefficient afin que la valeur moyenne soit égale à la consigne  $\Sigma^0$ . Ce coefficient appelé « coefficient de convergence » est calculé en fonction de la moyenne des contraintes de toutes les cellules de l'incrément précédent comme :

$$Coeff_{Conv} = \frac{\Sigma_{33}}{\langle \sigma_{33}^C \rangle_{N^C}} \quad (2.44)$$

## **2.4.2 Calcul d'élasticité par ÉF sur des agrégats polycristallins**

En effet, même si avec l'augmentation de la puissance des moyens de calcul, il est possible depuis une quinzaine d'années de réaliser des calculs par éléments finis sur des agrégats polycristallins (Barbe, 2001), ces calculs en champ complet ne sont conduits que sur plusieurs centaines de grains et ils nécessitent de nombreux essais afin de dégager des tendances représentatives. Pour confronter les résultats obtenus par la démarche simplifiée des automates cellulaires avec les champs moyens calculés par ÉF pour les grains et leur voisinage, une étude statistique est nécessaire. Dans un premier temps, la démarche statistique retenue (Castro, 2012) est appliquée en élasticité pour vérifier des solutions de référence et estimer la variabilité des champs moyens en fonction du voisinage. La procédure associée à ces calculs est rappelée ainsi que l'influence du nombre de grains et des orientations cristallines sur les résultats obtenus.

### **2.4.2.1 Génération des maillages ÉF pour les calculs d'agrégats**

La démarche suivie pour créer la géométrie et le maillage des agrégats est celle mise en place par Pascal et Di Paola (Di Paola, 2010) dans le code EF CAST3M. Dans un premier temps, on génère un nuage de points dans un cube unitaire. Chaque point représente le germe d'un grain. Ce tirage n'est pas totalement aléatoire, car deux contraintes sont imposées : i) un germe est situé au centre du cube pour positionner le grain central (celui-ci est ainsi le plus éloigné des faces du cube et donc des conditions aux limites mécaniques), ii) la distance de répulsion entre les germes est de l'ordre de grandeur de la taille moyenne de grain. Pratiquement, si le tirage d'un germe tombe à une distance inférieure à deux fois la distance de répulsion, il est rejeté et on procède à un autre tirage. Cette procédure nous permet de construire des grains relativement équiaxes (sauf pour ceux tronqués par les faces du cube).

Ce nuage de germes permet de diviser le cube en cellules de Voronoï (Figure 2-9) (Gilbert, 1962). Cette procédure va générer des grains polyédriques convexes donc la géométrie est proche de grains des alliages métalliques recristallisés. Ces grains polyédriques sont ensuite

maillés avec des tétraèdres à interpolation linéaire ou quadratique. Pour cela des éléments C3D4 (tétraèdre avec 4 nœuds et 1 point de Gauss) ont été utilisés. Chaque grain est maillé avec 1000 à 1200 éléments, ce qui permet de calculer les moyennes des composantes de la déformation ou de la contrainte avec une précision suffisante (Priser, 2011). Un exemple de maillage avec 512 grains est donné à la Figure 2-9.

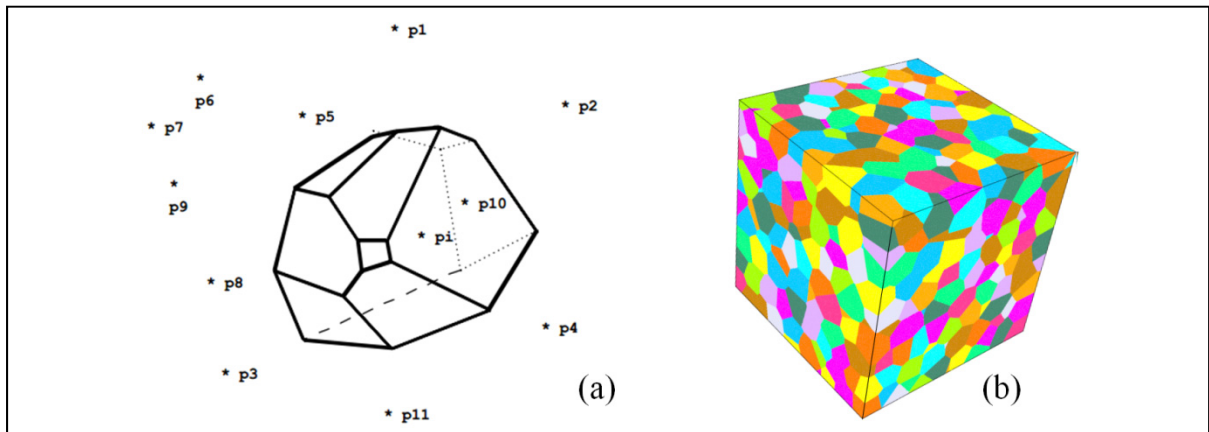


Figure 2-9 Cellule 3D de Voronoï représentant un grain polyédrique (a) maillage avec 512 grains généré par le code EF Cast3M (b) pour la visualisation, chaque grain est colorié

Pour les analyses mécaniques, on affecte à chaque grain une orientation cristallographique différente. Le tirage aléatoire des orientations est identique à celui utilisé pour les cellules des automates (voir 2.1.2). Cependant, puisque le nombre des grains de l'agrégat est limité, le tirage aléatoire ne peut pas assurer un agrégat isotrope. D'autre part, plusieurs essais doivent être effectués afin de reproduire un comportement macroscopique représentatif. Pour minimiser le nombre de calculs ÉF, la matrice de Kearns globale du tirage aléatoire des orientations d'un agrégat est contrôlée afin qu'elle soit la plus isotrope possible.

La notion de voisinage du grain central doit être également précisée pour les ÉF. Pour chaque maillage, les distances entre le barycentre du grain central et les barycentres des autres grains changent et sont calculées. Un seuillage relatif entre ces distances ( $\delta$ ) et le rayon équivalent ( $R_{\text{éq}}$ ) du grain central permet de définir et de compter les premiers voisins. Un critère de

seuillage de 1,9 ( $\delta < 1,9 R_{\text{éq}}$ ) a été utilisé. Pour l'ensemble de 3000 des maillages, le nombre moyen de premiers voisins vaut 6,5 (Min. 4 et Max. 9). La Figure 2-10 illustre cette notion de voisinage et fournit la distribution du nombre de premiers voisins pour les maillages utilisés dans ce travail. Pour la confrontation avec la méthode des AC, des configurations d'agrégats avec 6 premiers voisins et des configurations avec une orientation cristalline figée pour le grain central et pour son voisinage sont étudiées.

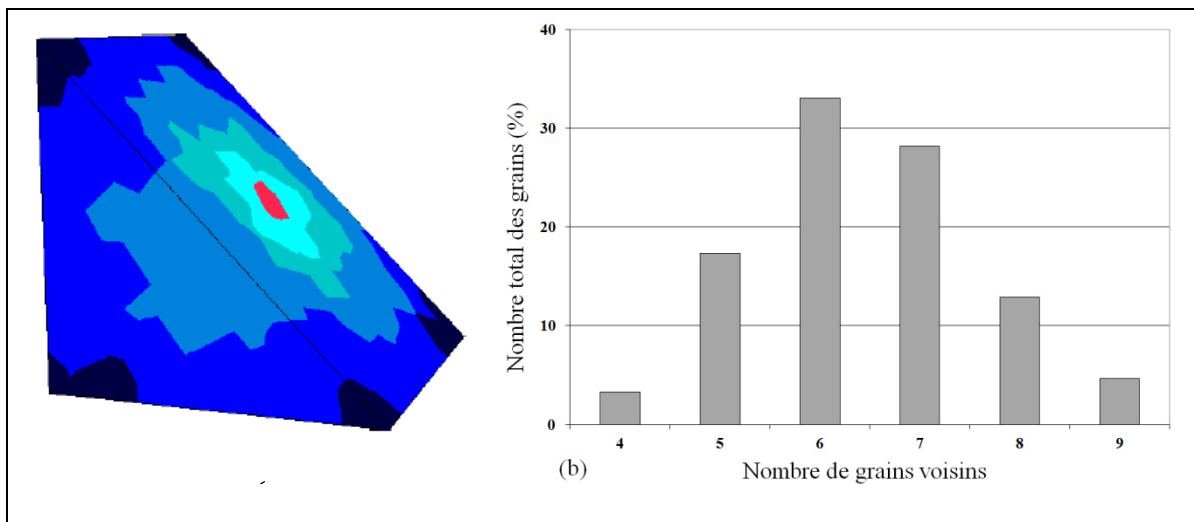


Figure 2-10 Coupe biaisée d'un agrégat visualisant le grain central (a) et ses trois niveaux du voisinage (Priser, 2011) (b) distribution du nombre de premiers voisins pour 3000 maillages.

#### 2.4.2.2 Calculs en élasticité anisotrope pour le titane

Un des inconvénients de ces calculs en champ complet est lié au caractère fini du domaine étudié. Les réponses obtenues, globale et locale, dépendent de chaque réalisation (maillage et choix des orientations). Une des questions importantes porte donc sur le nombre de réalisations à effectuer pour atteindre un objectif, tant à l'échelle macroscopique, qu'à l'échelle des grains. Avec un tirage aléatoire des orientations et si le nombre de réalisations indépendantes est élevé (*typiquement*  $> 1000$ ), la moyenne tendra vers un comportement isotrope à l'échelle du polycristal. En élasticité, on note alors  $K^h$  le module de compressibilité



et  $G^h$  le module de Coulomb de ce milieu isotrope. Pour obtenir ces grandeurs dans le cas de notre étude, les agrégats sont sollicités par un chargement sphérique (dilatation isotrope) et un cisaillement pur. Ces sollicitations sont appliquées avec des conditions aux limites mixtes sur des agrégats composés de 343 grains (environ 7 grains par arête) ou de 512 grains (environ 8 grains par arête) où uniquement la composante normale du déplacement est imposée et rien n'est imposé sur les composantes tangentielles (déplacement normal imposé et contrainte tangentielle nulle sur les faces). En sortie du calcul, on exploite les efforts résultants exercés sur les faces du cube (pour estimer, en élasticité,  $K^h$  et  $G^h$ ) et les champs moyens de la déformation et de la contrainte dans le grain central. Les constantes élastiques de la section 2.2.1 (Fisher, 1964) sont utilisées et les résultats sont comparés à la solution analytique obtenue par une approche auto-cohérente (Walpole, 1969).

Les valeurs moyennes ont été calculées pour 200 réalisations. En élasticité, la durée d'un calcul ÉF est faible (environ 1 à 2 minutes pour un agrégat de 343 grains et 3 à 4 minutes pour 512 grains sur une station de travail standard). Les résultats sont consignés dans le Tableau 2.3.

Tableau 2.3 Estimation des modules d'élasticité homogénéisés pour des agrégats isotropes pour 200 réalisations

Nombre de grains	$K^h$ (GPa)	$G^h$ (GPa)
343	321,81	43,46±0,10
512	321,81	43,45±0,08
Auto-cohérent	321,809	43,389

On constate que les résultats de la démarche statistique sont très proches de la solution obtenue par l'approche Auto Cohérente à l'échelle macroscopique. Ces résultats peuvent être également confirmés à l'échelle microscopique (la contrainte moyenne dans le grain central ( $\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{GC}$ ) lors d'une sollicitation hydrostatique). Ces résultats montrent que le modèle des ÉF est capable de reproduire des comportements très proches de ceux de l'approche Auto-Cohérente.

### 2.4.3 Comparaison des simulations en élasticité entre AC et ÉF

Pour une première étape de confrontation, des calculs en élasticité ont été effectués par les deux modèles (ÉF et AC) avec une contrainte macroscopique cible de 115 MPa (soit  $\approx E_{33} = 10^{-3}$ ) et les résultats sont comparés. Le comportement mécanique d'un grain appelé Grain Central (GC) en ÉF et Cellule Centrale (CC) en AC, est étudié pour deux orientations cristallographiques différentes. Deux orientations cristallographiques extrêmes sont étudiées; un grain rigide ( $\varphi_1 = \phi = \varphi_2 = 0^\circ$ ) et un grain souple ( $\varphi_1 = 0^\circ, \phi = 90^\circ, \varphi_2 = 15^\circ$ ). Les trois approches (section 2.3.1) de localisation en AC sont comparées dans cette étape de validation. Cela permet de comparer les trois différentes approches de localisation et de sélectionner celle qui donne les résultats les plus proches au modèle ÉF.

#### 2.4.3.1 Convergence de la contrainte du grain central

Avant de lancer des calculs pour étudier le comportement mécanique des cellules avec différentes orientations cristallographiques, il faut assurer que le nombre de réalisations effectuées en EF et en AC est suffisant pour représenter le comportement moyen d'un milieu infini. 900 réalisations sur un cube de 343 grains en EF, conduit à 308700 grains ce qui est plus que suffisant pour s'approcher d'un milieu infini. En AC, 1200 réalisations sur des automates cellulaires ayant avoir chacun 900 cellules constituent également un nombre suffisant de cellules.

Pour les 900 réalisations effectuées en ÉF, l'orientation du grain central reste constante et les orientations des autres grains de l'agrégat changent de façon aléatoire.

En AC, pour minimiser le nombre des calculs, 5 cellules avec une orientation cristallographique donnée sont intégrées dans une microstructure de 900 cellules afin d'obtenir 5 résultats par réalisation. Les 5 cellules sont suffisamment espacées pour que leur comportement n'interagisse pas. À chaque réalisation, l'orientation des 5 cellules étudiées reste constante et les orientations de 895 autres cellules de la microstructure varient

aléatoirement. Cette démarche a été possible, car le nombre des cellules modélisé en AC (900) est plus grand que le nombre de grains en ÉF (343). Ainsi, le temps du calcul en AC est bien inférieur de celui en ÉF. 240 microstructures virtuelles sont générées dont chaque une contient 5 cellules dites « centrales », ce qui est équivalent à 1200 réalisations sur la cellule centrale étudiée en 15 minutes.

Les Figure 2-11 et Figure 2-12 tracent l'évolution de la moyenne des valeurs en contrainte du grain/cellule central(e) en fonction de nombre de réalisations pour les orientations  $(0^\circ, 0^\circ, 0^\circ)$  et  $(0^\circ, 90^\circ, 15^\circ)$ , respectivement. La Figure 2-11 montre qu'en AC, les valeurs de convergence de  $\sigma_{33}^C$  obtenues pour l'approche 1 (126.7 MPa) et l'approche 3 (126.8 MPa) sont comparables avec la valeur obtenue par ÉF (126.1 MPa).

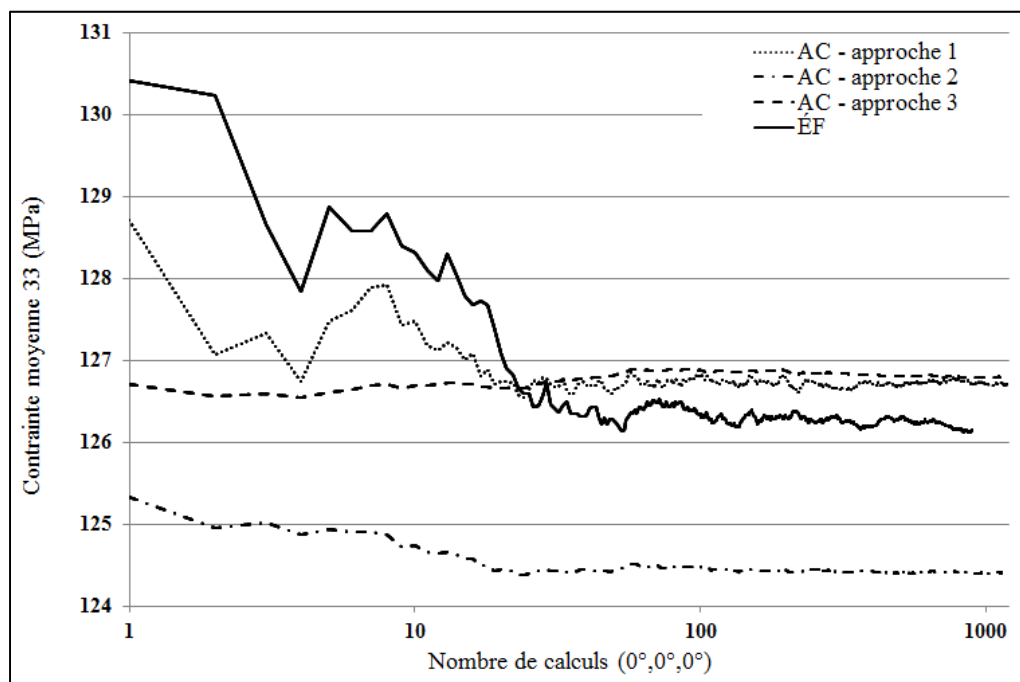


Figure 2-11 Évolution de la moyenne des valeurs en contrainte  $\sigma_{33}^C$  du grain/cellule central(e)  $(0^\circ, 0^\circ, 0^\circ)$  en fonction du nombre de réalisations

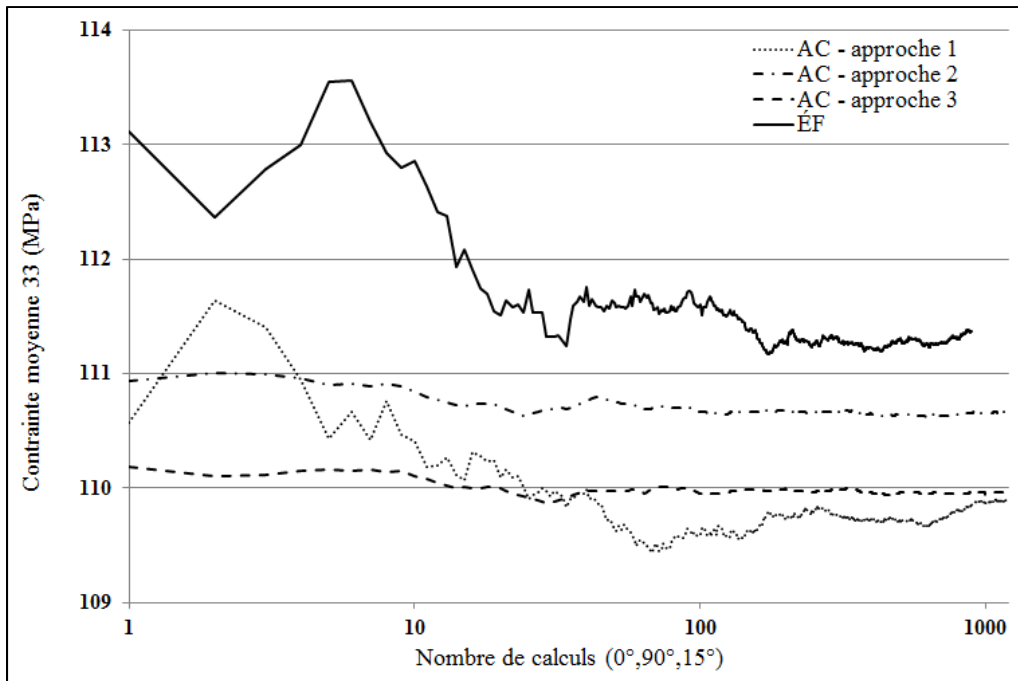


Figure 2-12 Évolution de la moyenne des valeurs en contrainte  $\sigma_{33}^C$  du grain/cellule central(e) ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) en fonction du nombre de réalisations

Pour l'orientation ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) l'approche 2 d'AC donne la meilleure estimation par rapport les ÉF. Pour les deux orientations, la contrainte  $\sigma_{33}^C$  tend vers une valeur moyenne après 600 réalisations pour les deux modèles AC et ÉF. C'est-à-dire, 600 calculs sont suffisants pour reproduire un comportement représentatif.

Le Tableau 2.4 résume la comparaison détaillée des moyennes de contrainte calculées pour les deux grains dur et souple par les deux modèles AC et ÉF et également les deux approches classiques de Voigt et Reuss.

Tableau 2.4 Comparaison de moyenne de contrainte de 900 cellules en ÉF et 1200 cellules en AC pour trois approches de localisation avec les estimations de Voigt et Reuss

<b>Modèle</b>						
<b>Contrainte (MPa)</b>	<b>ÉF</b>	<b>Approche 1</b>	<b>Approche 2</b>	<b>Approche 3</b>	<b>Voigt</b>	<b>Reuss</b>
Orientation 0 (0°,0°,0°)	126.1	126.7	124.4	126.8	141.6	115
Orientation 1 (0°,90°,15°)	111.4	109.9	110.6	110	103.2	115

On constate que les valeurs moyennes estimées par le modèle AC sont très proches à celles calculées par les ÉF avec moins de 1% d'écart. On note aussi que malgré le fait que l'hypothèse de Voigt soit utilisée pour calculer les propriétés effectives du voisinage en AC, la moyenne des contraintes des cellules (0°,0°,0°) ne sont pas aussi élevées que celle estimée par le modèle de Voigt et pour des cellules (0°,90°,15°) elle est supérieure de celle calculée par Voigt. En général, la contrainte moyenne des AC se place entre les valeurs estimées par les deux approches de Voigt et Reuss.

#### 2.4.3.2 Dispersion en contrainte du grain central en fonction du voisinage

Pour valider les approches de localisation, en plus de la moyenne, les distributions de contrainte en AC avec celle obtenue par ÉF sont comparées.

Orientation (0°,0°,0°) : grain rigide

Les distributions de contrainte  $\sigma_{33}^C$  du grain central rigide (0°,0°,0°) entre le modèle ÉF et le modèle AC pour les trois approches de localisation (Tableau 2.2) sont présentées dans les Figure 2-13, Figure 2-14 et Figure 2-15.

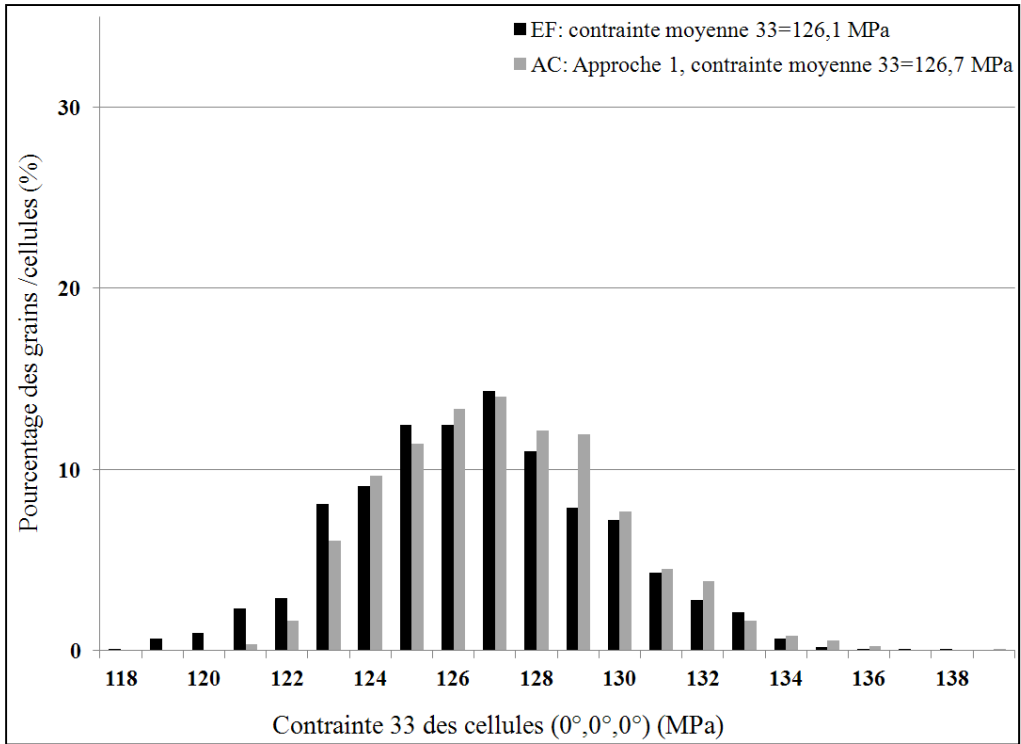


Figure 2-13 Comparaison de la distribution de  $\sigma_{33}^C$  des cellules  $(0^\circ, 0^\circ, 0^\circ)$  en fonction du nombre de réalisations; localisation en 1 étape

La distribution de contrainte  $\sigma_{33}^C$  obtenue par l'approche 1 en AC est quasiment identique de celle des ÉF. Par contre, les deux autres approches de localisation en deux étapes donnent des distributions beaucoup plus réduites par rapport celle des ÉF.

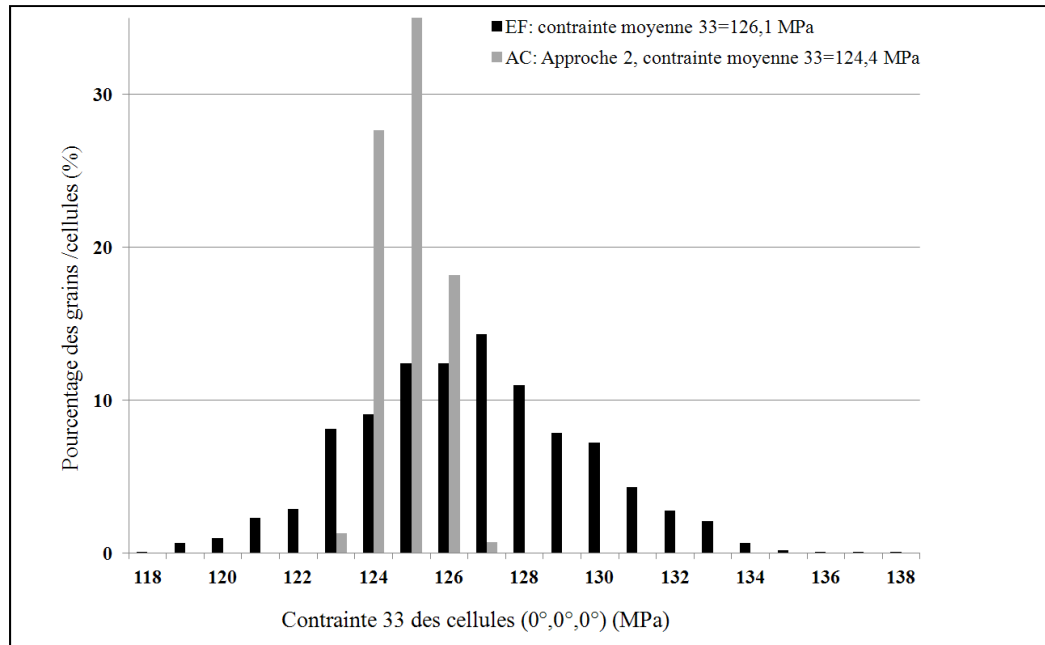


Figure 2-14 Comparaison de la distribution de  $\sigma_{33}^C$  des cellules  $(0^\circ, 0^\circ, 0^\circ)$  en fonction du nombre de réalisations; localisation en 2 étapes avec CC

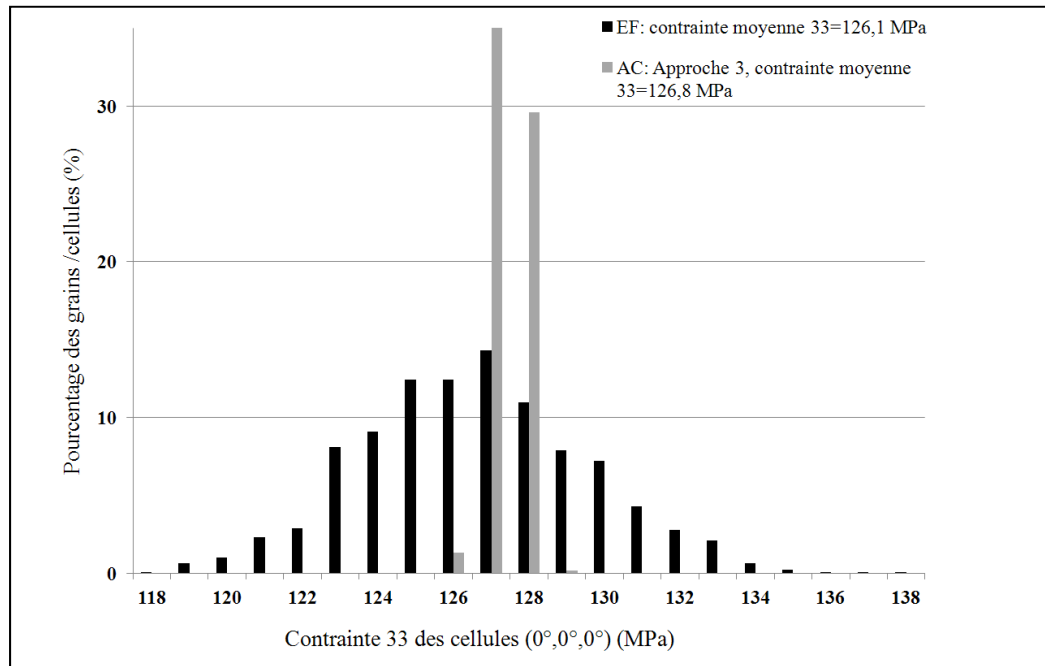


Figure 2-15 Comparaison de la distribution de  $\sigma_{33}^C$  des cellules  $(0^\circ, 0^\circ, 0^\circ)$  en fonction du nombre de réalisations; localisation en 2 étapes sans CC

Comme on voit sur la Figure 2-14, la distribution de contrainte obtenue par la localisation en deux étapes incluant la cellule centrale varie seulement de 122 à 127 MPa et si la cellule centrale est exclue, cela donne des contraintes encore moins dispersées par rapport les deux autres approches (Figure 2-15).

La Figure 2-16 montre le positionnement des résultats AC par rapport aux approches de Reuss et Voigt. Le modèle AC se place entre les deux bornes et donne une dispersion très proche de celles d'ÉF.

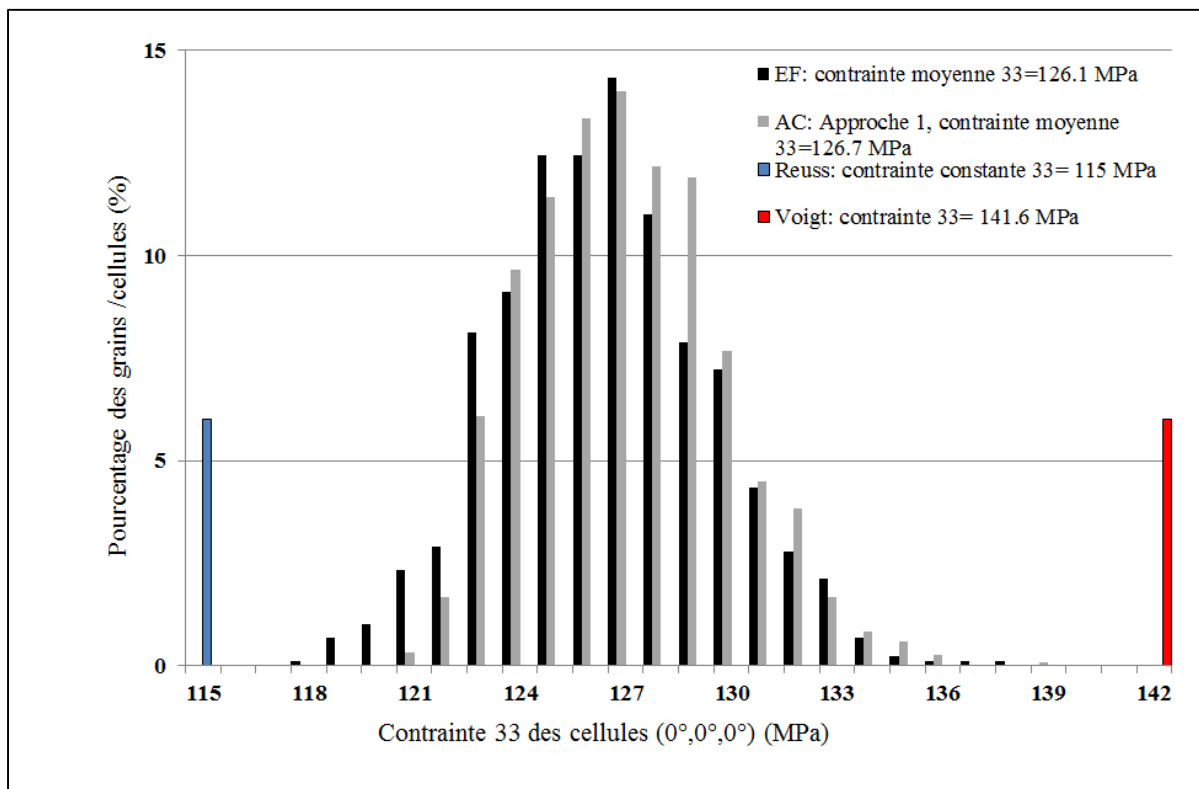


Figure 2-16 Comparaison de la distribution de  $\sigma_{33}^C$  des cellules (0°,0°,0°) en fonction du nombre de réalisations; approche 1 en AC et les bornes de Reuss et Voigt

Orientation (0°,90°,15°) : grain souple

La Figure 2-17 montre la distribution de contrainte obtenue par une étape de localisation en



AC comparée avec celle obtenue par ÉF pour le grain souple. On note que l'approche d'AC avec une étape de localisation donne une distribution très proche de celle d'ÉF.

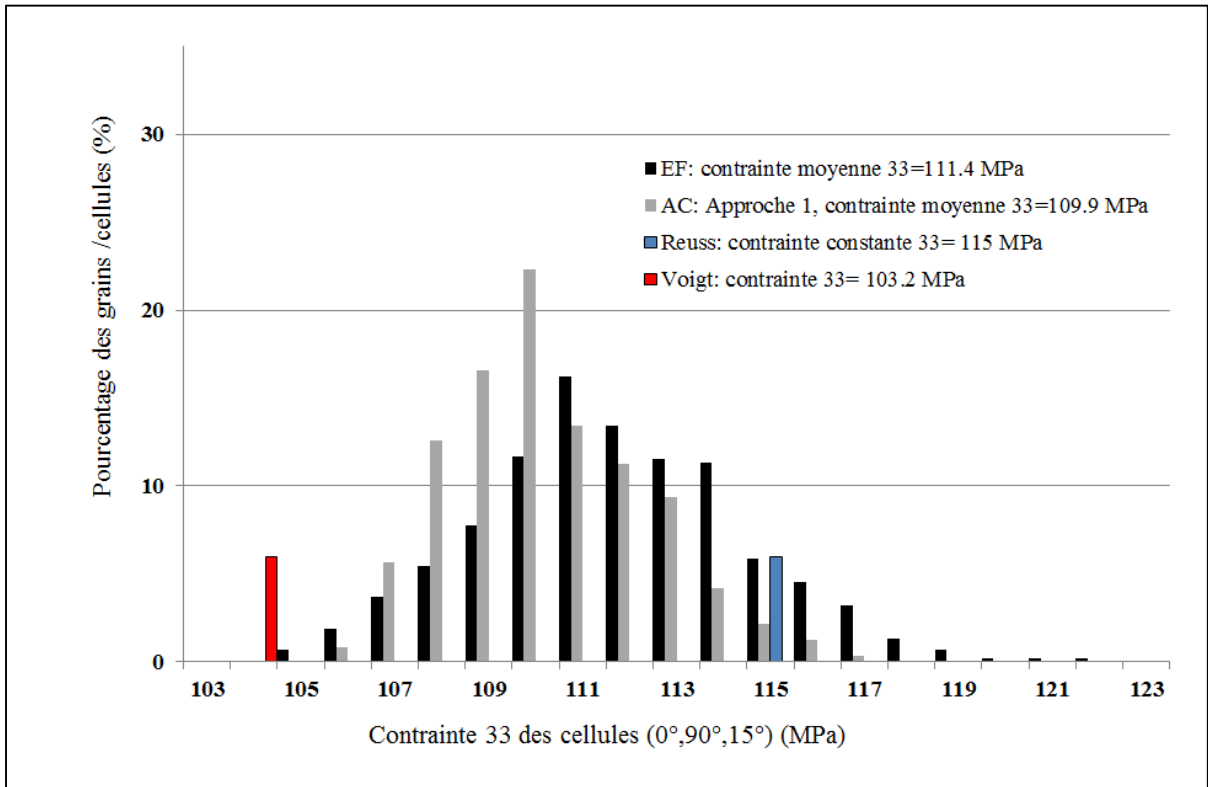


Figure 2-17 Comparaison de la distribution de  $\sigma_{33}^C$  des cellules (0°,90°,15°) en fonction du nombre de réalisations; approche 1 en AC et les bornes de Reuss et Voigt

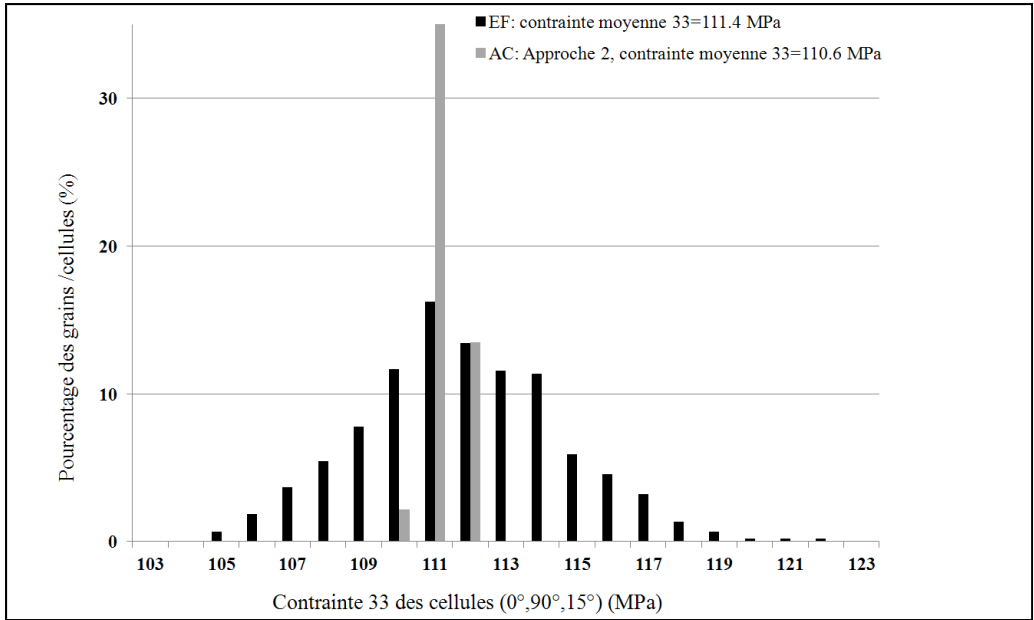


Figure 2-18 Comparaison de la distribution de  $\sigma_{33}^C$  des cellules ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) en fonction du nombre de réalisations; localisation en 2 étapes avec CC

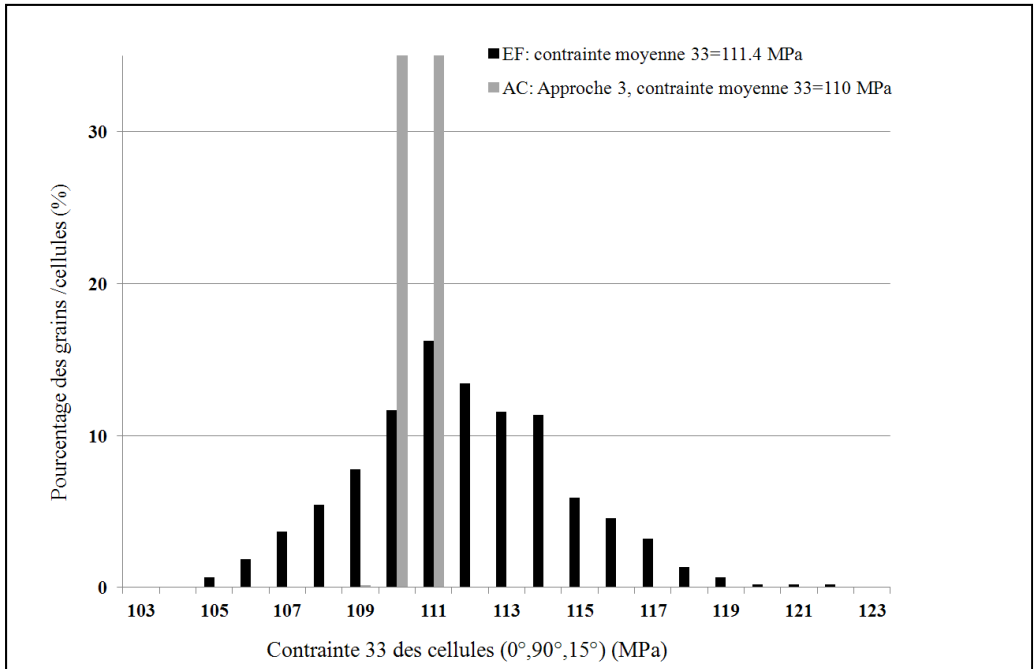


Figure 2-19 Comparaison de la distribution de  $\sigma_{33}^C$  des cellules ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) en fonction du nombre de réalisations; localisation en 2 étapes sans CC

La Figure 2-18 et la Figure 2-19 montrent, respectivement, les distributions de contraintes

obtenues par les approches en deux étapes de localisation avec et sans la cellule centrale comparées avec les résultats des ÉF de nouveau. Il apparaît que les distributions de contrainte estimées par ces deux approches sont moins étendues que celle obtenues par ÉF. Par contre, ces deux approches donnent des bonnes estimations au niveau de la moyenne de la contrainte des cellules ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ).

Au vu de ces résultats pour deux orientations avec des propriétés élastiques extrêmes, l'approche de localisation avec une seule étape donne des résultats très proches à ceux des ÉF. Ces résultats sont acceptables au niveau de la contrainte moyenne ainsi que de la distribution de la contrainte. Si les approches de localisation en deux étapes donnent une bonne estimation au niveau de la contrainte moyenne, ce n'est pas le cas pour la distribution des contraintes. Elles ont tendance à réduire les variations autour des valeurs centrales. Donc, l'approche de localisation en 1 étape sera adoptée dans le reste de la présente étude.

#### **2.4.3.3 Effet d'entraînement du voisinage**

Pour comprendre l'effet d'entraînement du voisinage sur le grain/cellule central(e) les matrices de Kearns peuvent être utilisées. Dans cette étude, le voisinage est caractérisé par un seul facteur de Kearns. Ce facteur correspond à la moyenne arithmétique des composantes 33 des matrices de Kearns des 6 cellules voisines (ANNEXE III). La composante 33 de matrice de Kearns est choisie, car elle représente l'intensité de texture suivant la direction de la charge uniaxiale appliquée. Le facteur de Kearns du voisinage suivant cette direction varie entre 0 et 1 où 0 correspond à un voisinage souple et à l'inverse un facteur de Kearns moyen égal à 1 signifie un voisinage rigide. La méthode de calcul du facteur de Kearns du voisinage en ÉF est identique de celle utilisée en AC. Cependant, le facteur de Kearns des grains en ÉF est pondéré par leurs fractions volumiques, car tous les grains n'ont pas la même taille.

La Figure 2-20 montre la déformation de 1200 cellules en AC et 500 grains en ÉF pour deux orientations ( $0^\circ, 0^\circ, 0^\circ$ ) et ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) en fonction de facteur de Kearns moyen du voisinage. Sur cette figure, on retrouve que dans les deux modèles, AC et ÉF, la dispersion en

déformation est comparable. Par contre, la dispersion de déformation en AC semble relier la déformation au facteur de Kearns moyen du voisinage de façon linéaire, ce qui n'est pas le cas en ÉF. Cette relation linéaire entre la déformation et le voisinage en AC est due au choix de ne définir le voisinage qu'avec 6 voisins. En ÉF, aucune hypothèse sur le voisinage n'est faite et d'autres grains que les voisins immédiats influencent le comportement du grain central. Donc aucune relation n'existe entre un grain et son voisinage.

La relation linéaire entre une orientation étudiée et son voisinage, en AC, indique que plus le voisinage est rigide (facteur de Kearns moyen élevé) plus la déformation est importante (Figure 2-20). Cet effet en AC peut être expliqué par le rôle de la matrice dans la déformation de l'inclusion dans la solution d'inclusion d'Eshelby. Imaginons une inclusion plongée dans une matrice rigide. Dans ce cas, la matrice se déforme peu et pour arriver à la déformation macroscopique imposée, l'inclusion doit se déformer plus afin de compenser la déformation nécessaire pour cet équilibre. D'autre part, une inclusion plongée dans une matrice souple (facteur de Kearns moyen faible) se déforme moins, car la matrice souple se déforme plus pour que la déformation macroscopique soit atteinte. Finalement, cette relation linéaire observée en AC est dans le bon sens par rapport aux hypothèses du voisinage prises, mais elle n'existe pas en ÉF en absence de ces hypothèses.

On note que pour un voisinage donné (facteur de Kearns du voisinage constant) la dispersion de déformation est moins prononcée en AC qu'en ÉF. Par contre, une question se pose ici : tandis qu'en AC la déformation de la cellule centrale ne dépend que de ses 6 voisins, pourquoi elle est dispersée pour un voisinage donné? En effet, la dispersion de la déformation en AC peut être expliquée par deux aspects; 1) effet du facteur de normalisation : le facteur de normalisation influence la déformation des cellules afin d'assurer que la moyenne de déformation de toutes les cellules est égale à la déformation macroscopique. Cela introduit une dispersion dans la cellule centrale malgré le fait que le facteur de Kearns du voisinage est constant; 2) le facteur du Kearns du voisinage est une moyenne des facteurs de Kearns des cellules voisines et il n'identifie pas l'intensité de la

texture du voisinage. Par exemple, deux voisinages avec le même facteur de Kearns peuvent avoir des cellules avec des facteurs de Kearns très différents.

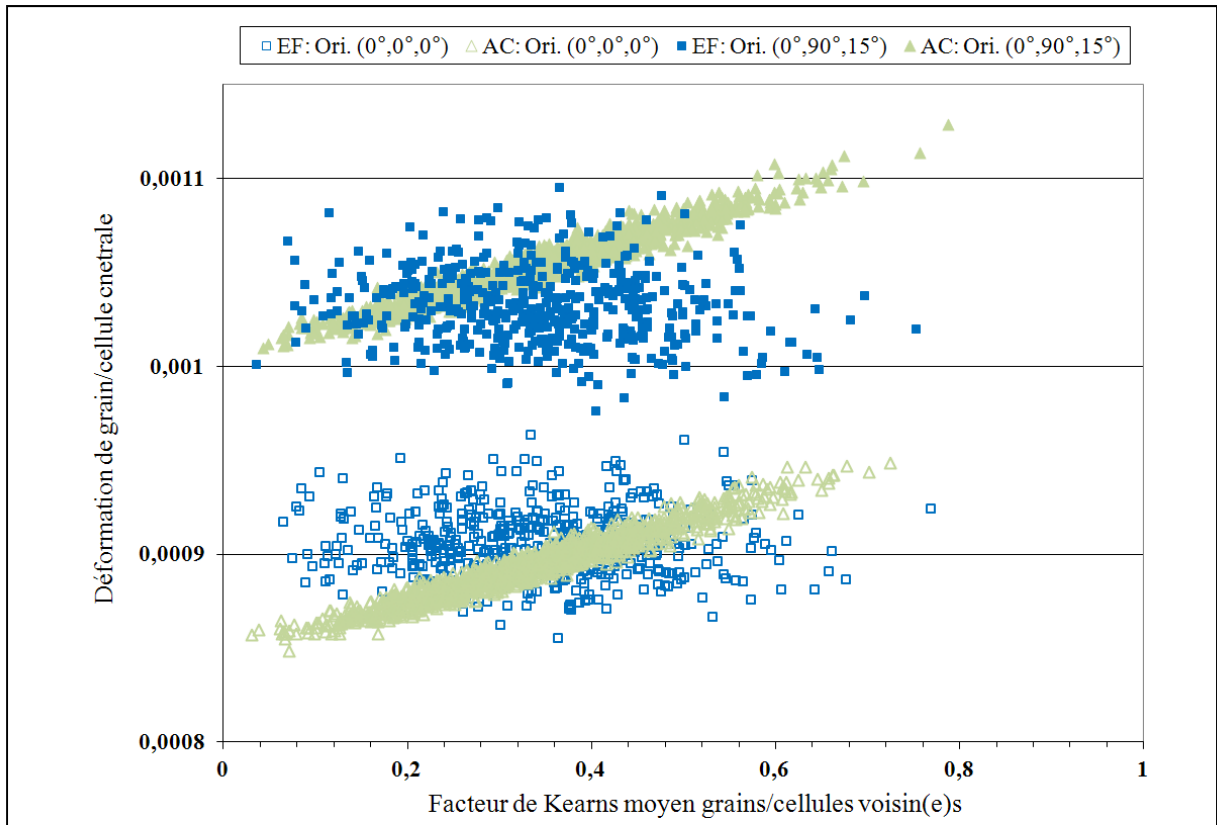


Figure 2-20 Comparaison de déformation en fonction de facteur de Kearns moyen du voisinage entre les cellules  $(0^\circ,0^\circ,0^\circ)$  et  $(0^\circ,90^\circ,15^\circ)$  en fonction du nombre de réalisations

La Figure 2-21 illustre la comparaison de contrainte de grain/cellule central(e) en fonction de facteur de Kearns du voisinage en AC et ÉF, pour les deux orientations  $(0^\circ,0^\circ,0^\circ)$  et  $(0^\circ,90^\circ,15^\circ)$ . Étant donné que la contrainte est la conséquence de la déformation, les arguments utilisés pour expliquer les résultats en déformation sont valides aussi pour la contrainte.

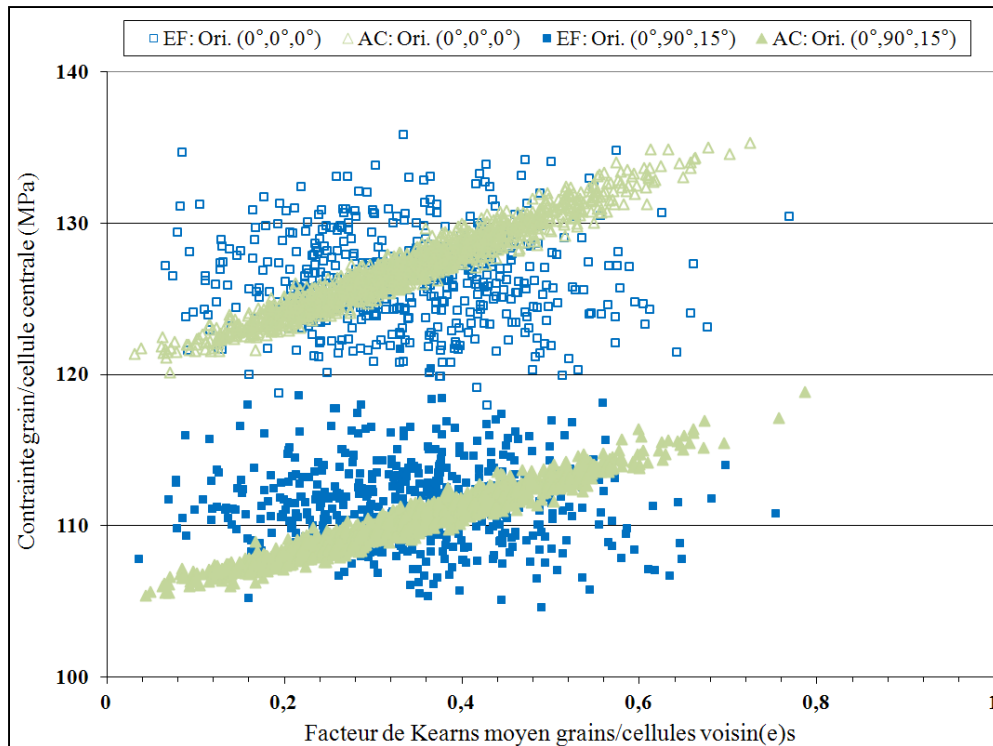


Figure 2-21 Comparaison de contrainte en fonction de facteur de Kearns moyen du voisinage entre les cellules  $(0^\circ, 0^\circ, 0^\circ)$  et  $(0^\circ, 90^\circ, 15^\circ)$  en fonction du nombre de réalisations

Pour montrer que la relation linéaire entre une cellule et son voisinage est due au fait que seulement six cellules sont prise en compte comme voisinage, des calculs similaires sont effectués en ÉF. 20 facteurs de Kearns du voisinage sont étudiés en ÉF où pour chaque cas 300 calculs sont effectués. Pour chaque calcul, les orientations du grain central et du voisinage sont figées. Le comportement du grain central pour deux orientations  $(0^\circ, 0^\circ, 0^\circ)$  et  $(0^\circ, 90^\circ, 15^\circ)$  est étudié. Pour éviter l'effet du maillage en ÉF, le maillage de tous les grains est gardé constant durant les calculs. La contrainte 33 du grain central en fonction de facteur de Kearns de son voisinage est tracée dans la Figure 2-22. Chaque point sur cette figure présente la moyenne de 300 calculs effectués. L'écart type est autour de 4 et 3.6 MPa pour l'orientation  $(0^\circ, 0^\circ, 0^\circ)$  et  $(0^\circ, 90^\circ, 15^\circ)$ , respectivement. On constate qu'en figeant les orientations de grain central et le voisinage, une relation linéaire entre le grain et son voisinage existe. Cette tendance linéaire est plus claire sur la Figure 2-23 où les résultats d'ÉF sont comparés avec ceux d'AC. Les tendances linéaires sont tracées sur cette figure

pour le quatre cas de simulation. On note que le comportement local en ÉF tend vers le comportement d'AC pour les deux orientations étudiées. Cette tendance est plus marquée pour l'orientation  $(0^\circ, 90^\circ, 15^\circ)$ . Cependant, pour les deux orientations la pente en AC est plus élevée que pour les ÉF. Cela peut être dû à l'effet d'autres grains dans l'agrégat. Si le deuxième ordre du voisinage était pris en compte dans les calculs des AC, la pente deviendrait plus faible et les résultats approcheraient à ceux des ÉF.

La dispersion de contrainte pour un facteur de Kearns du voisinage donné, comme mentionné précédemment, est due au fait que le facteur de Kearns du voisinage est une valeur moyenne et ne prend pas en compte le comportement individuel des grains.

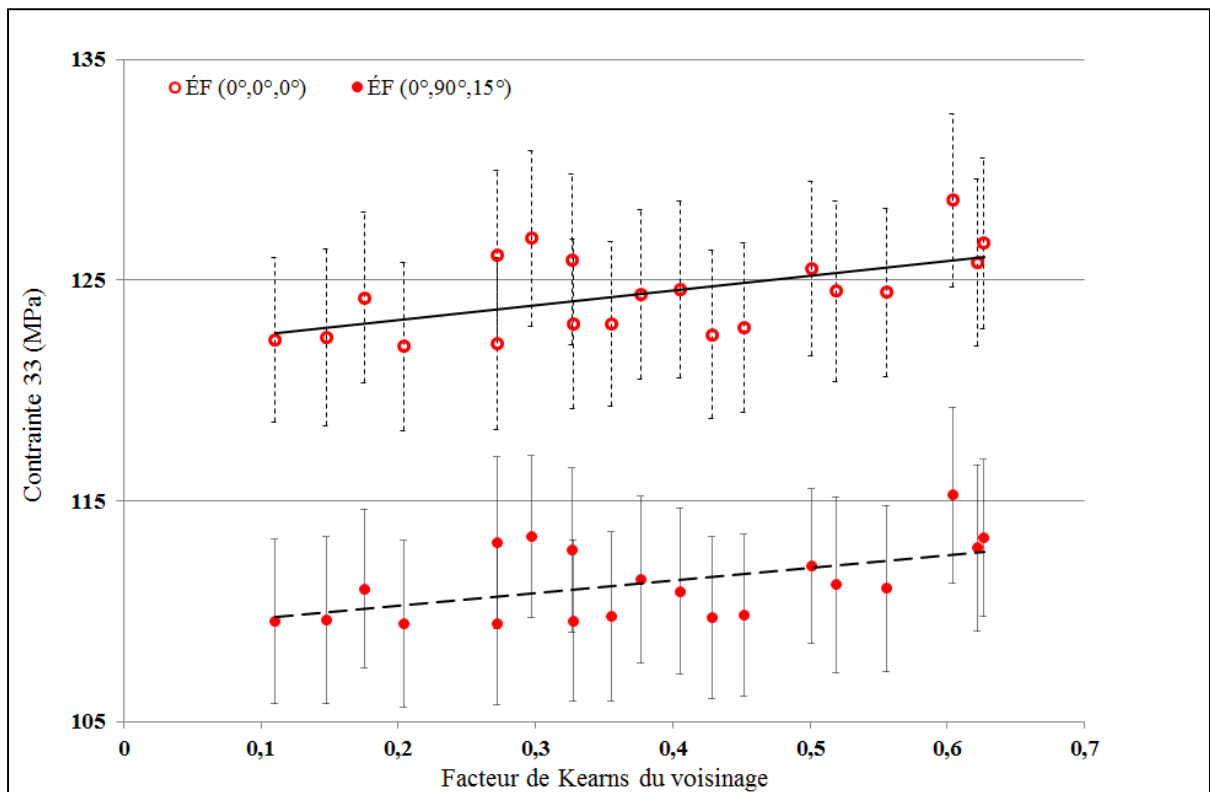


Figure 2-22 Calculs ÉF avec des facteurs de Kearns du voisinage figés pour deux orientations  $(0^\circ, 0^\circ, 0^\circ)$  et  $(0^\circ, 90^\circ, 15^\circ)$

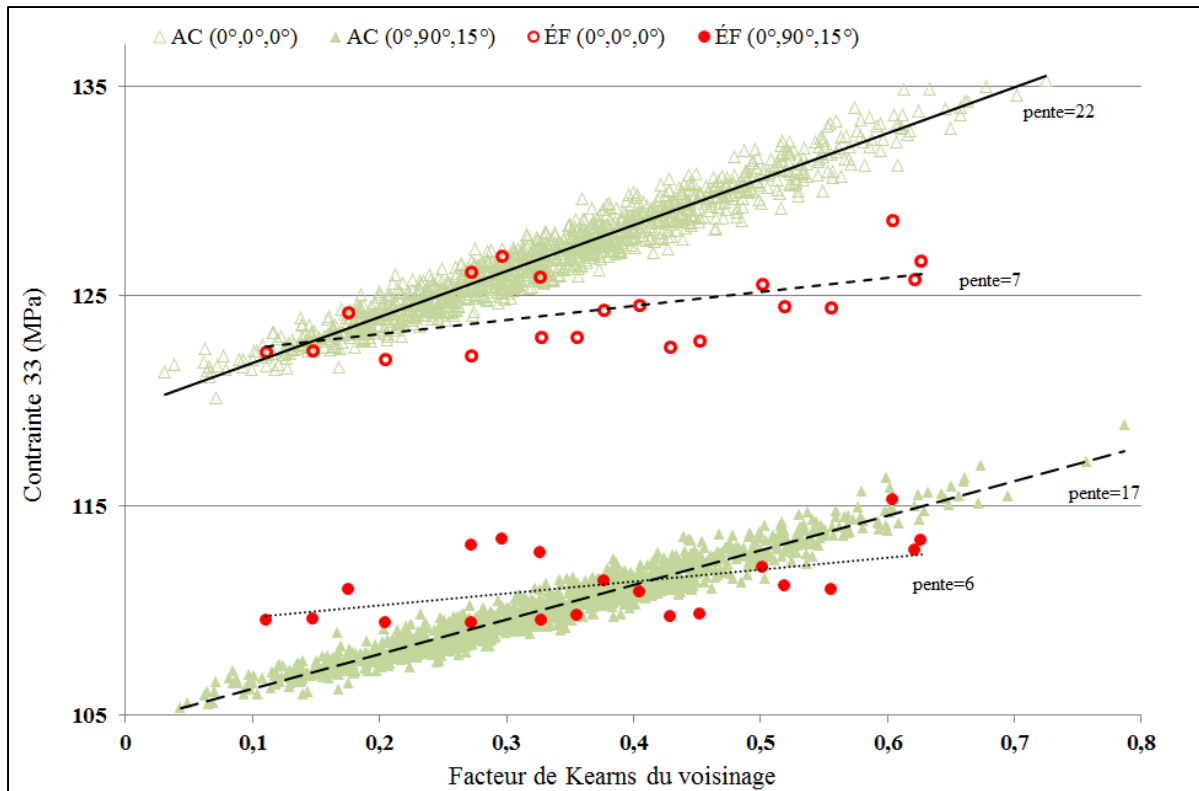


Figure 2-23 Comparaison de contrainte en AC et ÉF pour deux orientations  $(0^\circ, 0^\circ, 0^\circ)$  et  $(0^\circ, 90^\circ, 15^\circ)$  avec des voisinages figés en ÉF

Ces résultats montrent qu'en limitant le nombre des voisins peut effectivement affecter le comportement du cellule/grain central(e) et créer une linéarité du comportement entre la cellule/grain et son voisinage.

## 2.5 Conclusion

Dans ce chapitre, la méthode des automates cellulaires est utilisée pour développer le modèle AC qui permet de modéliser le comportement mécanique des microstructures non texturées. Ainsi, un modèle des ÉF est présenté comme un moyen de confrontation des résultats des AC. Les étapes de construction et les descriptions mathématiques des deux modèles AC et ÉF sont présentés.

Une règle de transition d'échelle basée sur la théorie d'Eshelby est utilisée dans le modèle AC pour calculer les champs des contraintes et des déformations locales. Trois approches de



localisation sont proposées et l'approche qui donne la meilleure estimation par rapport des ÉF est choisie.

En élasticité, la distribution des déformations et des contraintes locales estimées par les AC sont très similaires à celles des ÉF en termes de la moyenne et la distribution. Cependant, l'analyse d'effet d'entraînement du voisinage par AC montre des corrélations linéaires entre les champs de contrainte et de déformation locaux et le voisinage. Ce résultat est une conséquence de l'hypothèse du voisinage qui fait dépendre le comportement des cellules centrales du comportement de leurs six premiers voisins seulement. Cet effet qui est dû au choix du voisinage n'apparaît pas dans les résultats des ÉF, cependant, en fixant le voisinage en ÉF on constate qu'une relation linéaire entre le comportement du grain central et son voisinage apparaît. La pente de cette corrélation linéaire est plus forte en AC qu'en ÉF qui peut être due à l'effet de second ordre du voisinage.



## CHAPITRE 3

### SIMULATIONS EN ÉLASTOPLASTICITÉ PAR AC ET ÉF

Dans ce chapitre les comportements élastoplastiques des modèles AC et ÉF sont comparés et discutés. La description mathématique du modèle élastoplastique des AC sera suivie par les détails du modèle élastoplastique des ÉF. Les tenseurs de contrainte et de déformation sont étudiés et comparés à l'échelle macroscopique ainsi qu'à l'échelle locale. À l'échelle des grains, trois différentes orientations cristallographiques de grain/cellule central(e) sont étudiées. À la fin de ce chapitre, les contraintes résiduelles sont modélisées par les deux modèles pour deux orientations cristallographiques et les résultats sont comparés.

#### 3.1 Chargement élastoplastique simulé par les AC

Comme déjà mentionné, un des buts de cette étude est de modéliser des phénomènes complexes via un modèle simple basé sur les AC : une loi de comportement élastoplastique avec un écrouissage linéaire isotrope est utilisée. Le critère de plasticité de cette loi est identique pour toutes les cellules. Les paragraphes suivants présentent les détails de la loi de comportement élastoplastique.

##### 3.1.1 Systèmes de glissement et facteur de Schmid

Les études bibliographiques présentées dans le premier chapitre montrent que les systèmes de glissement basaux et prismatiques sont les systèmes qui s'activent le plus facilement dans des alliages de titane.

Les travaux de Wang (Wang *et al.*, 2007) montrent l'activation de ces systèmes de glissement dans des nodules d'alpha primaire dans un alliage d'IMI834 lors d'essai en dwell-fatigue. Des résultats semblables à ceux de Wang ont été obtenus par Bridier (Bridier, 2008)

pour un alliage de titane Ti-6Al-4V en fatigue. Bridier montre que les systèmes de glissement prismatiques et basaux respectivement sont les systèmes les plus activés et il y a peu d'évidence sur l'activation des systèmes pyramidaux. D'autres travaux expérimentaux sur les mécanismes d'endommagement effectués par (Bache, 1997; Sinha, 2007) montrent le rôle important des plans basaux sur les mécanismes d'amorçage et la formation des facettes en dwell-fatigue.

Dans le modèle développé ici, seulement les deux systèmes de glissement observés (basal et prismatique) sont introduits. Chaque système de glissement est défini par un plan et une direction de glissement. Les plans et les directions de six systèmes de glissement basaux et prismatiques d'un cristal HCP sont montrés dans le Tableau 1.1. Ces systèmes de glissement ont été utilisés pour calculer les facteurs de Schmid des cellules dans une microstructure. Les hypothèses suivantes ont été considérées i) chaque cellule est supposée activer un seul système de glissement. En particulière, les systèmes basaux et prismatiques ne s'activent pas ensemble dans une cellule; ii) les facteurs de Schmid sont calculés pour chaque cellule pour une traction uniaxiale dans la direction  $\vec{V} = [0, 0, 1]^{ref}$ .

Pour calculer des facteurs de Schmid des cellules, la matrice de Schmid de chaque système de glissement  $\underline{\underline{S}}_s^{ref}$  est calculée dans le repère macroscopique en utilisant les coordonnées du plan et de direction du système. Par conséquent, six matrices de Schmid sont calculées, trois pour les systèmes de glissement basaux et trois pour les systèmes de glissement prismatiques. La matrice de Schmid  $\underline{\underline{S}}_s^{ref}$  pour chaque système de glissement dans le repère macroscopique s'obtient par l'équation suivante (les plans et les directions de glissement basal et prismatique d'une maille HCP dans un repère orthonormé sont présentés dans l'ANNEXE I) :

$$\underline{\underline{S}}_s^{ref} = \frac{1}{2}(\vec{l}_s \otimes \vec{n}_s + \vec{n}_s \otimes \vec{l}_s) \quad (3.1)$$

Pour calculer le facteur de Schmid maximum de chaque cellule, il faut décrire les matrices de

Schmid dans le repère macroscopique. Cela nécessite la rotation des six matrices de Schmid pour chaque cellule. Les six étapes de rotation peuvent être remplacées par une seule rotation. Cette dernière consiste en une rotation de la matrice de direction de la charge  $A^{ref}$  dans le repère de cellule en utilisant la matrice de rotation  $G^C$ . C'est-à-dire, la direction de la charge est projetée dans les coordonnées des cellules. L'équation suivante montre cette étape de rotation:

$$\underline{\underline{A}}^C = G^C \cdot \underline{\underline{A}}^{ref} \cdot (G^C)^T \quad (3.2)$$

où  $A^C$  est les matrices de direction de la charge respectivement dans le repère de la cellule. Comme a été mentionnée, ici, la charge imposée est une charge uniaxiale dans la direction  $\vec{V} = [0, 0, 1]^{ref}$ . Donc, la matrice de direction de la charge  $A^{ref}$  se définit comme :

$$\underline{\underline{A}}^{ref} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

En utilisant les six matrices de Schmid et la matrice  $A^C$ , six facteurs de Schmid s'obtiennent par l'équation suivante:

$$f_{Sch}^s = \underline{\underline{A}}^C : \underline{\underline{S}}_s^{ref} \quad (3.4)$$

Le facteur de Schmid maximum parmi les six systèmes de glissement basaux et prismatiques est considéré comme le facteur de Schmid de la cellule.

$$f_{Sch}^C = \max(f_{Sch}^s) \quad (3.5)$$

En ne prenant qu'un seul type système de glissement, une cellule ayant un angle  $\theta=30^\circ$  aura un facteur de Schmid basal et une cellule avec un angle  $\theta=90^\circ$  aura un facteur de Schmid prismatique. La Figure 3-1 montre le triangle standard avec la frontière basal et prismatique des facteurs de Schmid. On remarque que les orientations sont divisées en deux zones, l'une basal et l'autre prismatique.

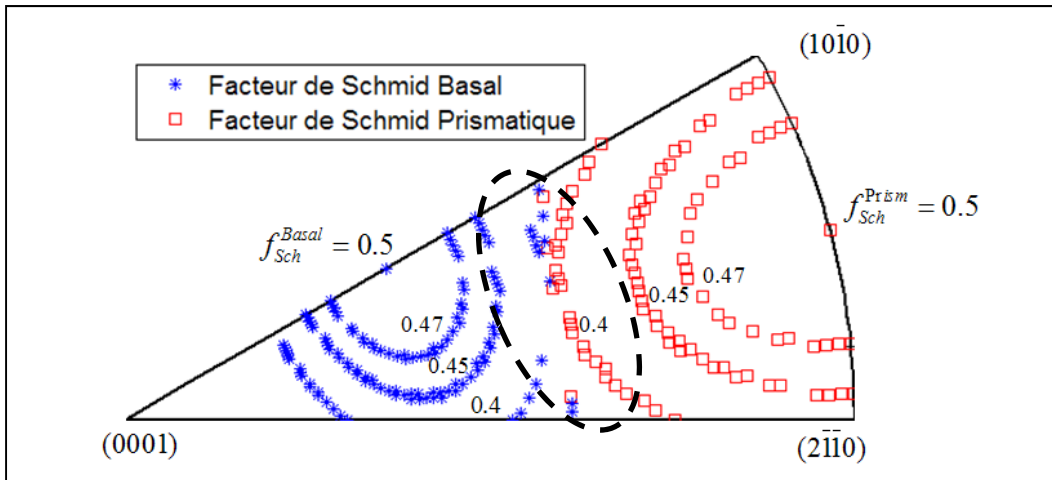


Figure 3-1 Répartition des facteurs de Schmid maximaux basal et prismatique

### 3.1.2 Cissions critiques des systèmes de glissement

Pour chaque cellule dans une zone du triangle standard (Figure 3-1), un seul système de glissement basal ou prismatique est considéré dans cette étude. L'observation expérimentale de Bridier (Bridier, 2008; 2009) montre que dans un alliage de titane les systèmes de glissement basal et prismatique s'activent au même niveau de déformation (Tableau 3.1). Pour modéliser ce comportement expérimental, la cission critique des systèmes de glissement prismatique est ajustée sur la cission critique basal. Cet ajustement permet que les cellules plastifient au même niveau de déformation. Pour cela, une relation de proportionnalité est utilisée pour relier les cissions critiques de deux cellules ayant des facteurs de Schmid basal et prismatique maximal ( $\theta=45^\circ$  et  $\theta=90^\circ$ ) à leurs modules d'élasticité (117 GPa et 104.4 GPa). La Figure 3-2 présente les détails de cet ajustement tout en gardant la cission critique basal constante. On constate que la plasticité commence dans les deux cellules pour le même

niveau de déformation. On obtient, par la suite, une valeur de cisssion critique pour les systèmes de glissement prismatique :

$$\tau_{CRSS}^{Prism} = 375MPa \quad (3.6)$$

Cette valeur est voisine d'une donnée expérimentale de 370 MPa présentée dans le Tableau 3.1.

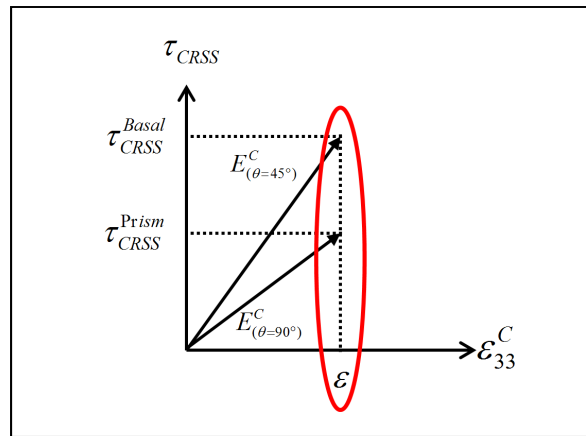


Figure 3-2 Ajustement la cission critique prismatique avec la cission critique basale

Le Tableau 3.1 présente les cissions critiques expérimentales des systèmes de glissement basaux et prismatiques de l'alliage étudié et celles utilisées dans le modèle AC développé ici.

Tableau 3.1 Cissions critiques des systèmes de glissement d'un cristal HCP d'un alliage Ti-6Al-4V (Bridier, 2009)

$\tau_{CRSS}$ (MPa)	Expérimental	Utilisé dans le modèle AC
<b>Basal</b> (0001) $\langle \bar{1}2\bar{1}0 \rangle$	420	420
<b>Prismatique</b> $\{10\bar{1}0\} \langle \bar{1}2\bar{1}0 \rangle$	370	375

### 3.1.3 Loi de comportement élastoplastique avec un écrouissage isotrope linéaire

Dans cette section, on a besoin de décrire le comportement élastoplastique d'un chargement tridimensionnel où les six composantes de la charge imposée peuvent influencer le comportement mécanique. Décrire un comportement élastoplastique nécessite la définition d'un critère de plasticité, de l'écrouissage et d'une loi d'écoulement plastique qui prennent en compte ces spécifications.

#### *I) Critère de plasticité :*

Ce critère permet d'identifier, pour une sollicitation donnée, l'état de contrainte à partir duquel la plasticité commence. Ce critère peut être défini comme une fonction à valeurs scalaire de la contrainte et l'écrouissage. Cette fonction appelée « fonction de charge »  $f(\underline{\sigma})$  est utilisée comme un critère de plasticité. La valeur de cette fonction de charge est reliée à la surface de charge. Cette surface définit le domaine d'élasticité ( $f=0$ ).

#### *II) Écrouissage isotrope $R$ :*

Au cours de l'écoulement plastique, la surface de charge évolue. Cette évolution est gouvernée par l'écrouissage. Pour assurer que la fonction de charge soit toujours nulle sur le bord du domaine d'élasticité, la fonction de charge doit prendre en compte l'écrouissage. Dans cette étude un écrouissage isotrope  $R$  est considéré pour la modélisation du comportement élastoplastique de l'AC en sollicitation monotone. L'écrouissage isotrope est caractérisé par un scalaire qui consiste en une dilatation homothétique de la surface de charge par rapport à son origine (François, 1991).

En se basant sur le critère de von Mises, la fonction de charge en tenant compte de la contrainte  $\underline{\sigma}$  et l'écrouissage isotrope  $R$  s'écrit comme :



$$f(\underline{\underline{\sigma}}, R) = J_2(\underline{\underline{\sigma}}) - R \quad (3.7)$$

où  $J_2(\underline{\underline{\sigma}})$  est un invariant de contrainte indépendant de la pression hydrostatique dans le cas du critère de von-Mises. Il est égal à :

$$J_2(\underline{\underline{\sigma}}) = \sqrt{\frac{3}{2} \underline{\underline{\sigma}}^d : \underline{\underline{\sigma}}^d} \quad (3.8)$$

où  $\underline{\underline{\sigma}}^d$  est la partie déviatorique de la contrainte ( $\underline{\underline{\sigma}}^d = \underline{\underline{\sigma}} - \frac{1}{3} Tr(\underline{\underline{\sigma}}) \underline{\underline{I}}$ ).

Par convention, si la fonction de charge est négative, la réponse est élastique et quand elle est positive, la plasticité commence. Pour certains matériaux comme les alliages de titane où la plasticité en fatigue n'est pas trop prononcée, le comportement non linéaire de plasticité peut être modélisé par un écrouissage linéaire. Dans cette étude, l'écrouissage isotrope  $R$  est défini par une fonction linéaire :

$$R = \sigma_y^C + Hp \quad (3.9)$$

où  $\sigma_y^C$  est le seuil initial de la plasticité,  $H$  est un module d'écrouissage et  $p$  est la déformation plastique cumulée.

Le seuil de déformation plastique  $\sigma_y^C$  est défini pour chaque cellule en fonction de son facteur de Schmid  $f_{Sch}^C$  et sa cission critique  $\tau_{CRSS}$ . La contrainte critique de la plasticité dans la direction de la charge  $e_3^{ref}$  s'écrit comme:

$$\sigma_y^C = \frac{\tau_{CRSS}^{Basal}}{f_{Sch}^C} \quad \text{or} \quad \sigma_y^C = \frac{\tau_{CRSS}^{Prism}}{f_{Sch}^C} \quad (3.10)$$

Le module d'écrouissage  $H$  est supposé constant dans le modèle AC pour toutes les orientations pour garder le modèle le plus simple possible et il est obtenu par une calibration sur des calculs élastoplastiques par ÉF (voir ANNEXE II).

$$H=60\ 000\ MPa \quad (3.11)$$

La déformation plastique cumulée  $p$  est un scalaire qui mesure la longueur du trajet de déformation. Elle présente la variable d'état de l'écrouissage isotrope et s'écrit :

$$dp = \sqrt{\frac{2}{3} d\underline{\underline{\varepsilon}}_p : d\underline{\underline{\varepsilon}}_p} \quad (3.12)$$

III) *Loi d'écoulement – règle de normalité :*

La loi d'écoulement plastique exprime une relation entre le tenseur de contrainte situé sur la surface de charge et la direction de la vitesse de déformation. Cette loi donc peut être décrite par une règle de normalité. La règle de normalité s'écrit :

$$d\underline{\underline{\varepsilon}}_p = d\lambda \underline{\underline{n}} \quad (3.13)$$

où

$$\underline{\underline{n}} = \frac{\partial f}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} = \frac{3}{2} \frac{\underline{\underline{\sigma}}^d}{J_2} \quad (3.14)$$

où  $\underline{\underline{n}}$  représente la normale extérieure à la surface de charge et  $\lambda$  est un scalaire appelé « multiplicateur plastique ». Le multiplicateur plastique peut prendre une valeur quelconque, mais il est toujours positif ( $\lambda \geq 0$ ), donc, la vitesse de déformation  $d\underline{\underline{\varepsilon}}_p$  et la normale extérieure à la surface de charge  $\underline{\underline{n}}$  ont toujours le même signe. La Figure 3-3 montre la règle de normalité.

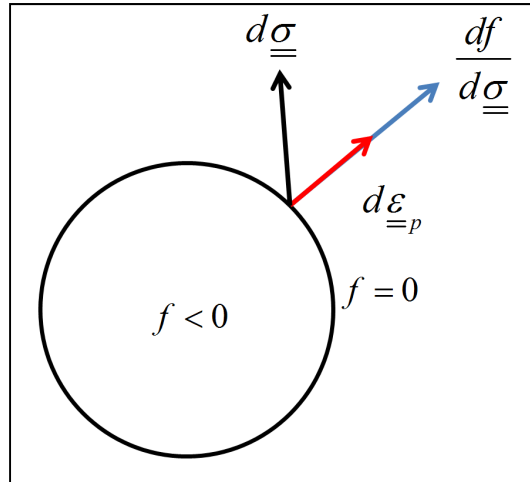


Figure 3-3 La règle de normalité

En remplaçant l'équation (3.13) dans l'équation (3.12) et utilisant le fait que  $\underline{n} : \underline{n} = \frac{3}{2}$ , on déduit que :

$$dp = d\lambda \quad (3.15)$$

Pour calculer le multiplicateur plastique  $\lambda$ , on utilise la condition de cohérence ( $f = 0$  et  $df = 0$ ) qui assure l'évolution de la surface de charge avec la plasticité. On obtient alors :

$$\frac{\partial f}{\partial \underline{\sigma}} \cdot d\underline{\sigma} + \frac{\partial f}{\partial R} \cdot dR = 0 \rightarrow \underline{n} : d\underline{\sigma} - H dp = 0 \quad (3.16)$$

On réécrit l'équation (3.16) comme :

$$dp = d\lambda = \frac{\underline{n} : d\underline{\sigma}}{H} \quad (3.17)$$

Pour un cas d'élasticité isotrope le tenseur de contrainte peut être écrit comme :

$$d\underline{\sigma} = C : (d\underline{\varepsilon} - d\underline{\varepsilon}_p) \quad (3.18)$$

On remplaçant l'équation (3.18) dans l'équation (3.17), le multiplicateur plastique s'obtient alors :

$$d\lambda = \frac{\langle \underline{\underline{n}} : (\underline{\underline{C}} : d\underline{\underline{\varepsilon}}) \rangle}{3\mu + H} \quad (3.19)$$

où  $\langle x \rangle = \max(0, x)$ . Si la fonction de charge  $f$  est négative, le comportement reste élastique et  $d\underline{\underline{\varepsilon}}_p = dp = 0$ .

### 3.1.4 Chargement élastoplastique

Le fait d'entrer dans le domaine plastique fait que la charge macroscopique n'est pas imposée en deux étapes comme le cas du chargement élastique, mais elle est imposée de façon incrémentale. La valeur de l'incrément est de 1 MPa (voir ANNEXE II) et sont définis  $\Delta\underline{\underline{\Sigma}}(n)$  comme:

$$\Delta\underline{\underline{\Sigma}}(n) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} (MPa) \quad (3.20)$$

où  $n$  présente le numéro d'incrément. Pour chaque incrément, le tenseur de déformation macroscopique imposée  $\Delta\underline{\underline{E}}(n)$  se calcule par la loi de Hooke et en fonction de l'incrément de déformation plastique macroscopique correspondant  $\Delta\underline{\underline{E}}^p$  et s'écrit comme :

$$\Delta\underline{\underline{E}}(n) = \frac{1}{E^{Macro.}} \left[ (1 + \nu) \Delta\underline{\underline{\Sigma}}(n) - \nu Tr(\Delta\underline{\underline{\Sigma}}(n)) \underline{\underline{I}} \right] + \Delta\underline{\underline{E}}_p(n-1) \quad (3.21)$$

L'incrément de déformation plastique macroscopique  $\Delta\underline{\underline{E}}_p$  intervient dans le calcul de la déformation macroscopique (Éq. (3.21)), car l'approche de localisation utilisée dans ce

modèle est basée que sur les propriétés élastiques des cellules. C'est-à-dire qu'au cours d'un chargement, l'approche de localisation ne prend pas en compte la plasticité. Donc, le tenseur de déformation plastique macroscopique  $\underline{\underline{\Delta E}}_p$  est calculé à la fin de chaque incrément  $n-1$  de la charge imposée et il est ajouté au tenseur de déformation imposée à l'incrément suivant  $n$  dans l'équation (3.21). Cela permet de traiter la plasticité due à chaque incrément dans l'incrément suivant et la localisation est basée sur une déformation élastique + plastique.

Il faut noter que la déformation plastique macroscopique n'est pas égale à la moyenne des déformations plastiques des cellules. Puisque, la déformation plastique des cellules est influencée par l'hétérogénéité introduite par l'angle  $\theta$ , mais la déformation plastique macroscopique est influencée par le tenseur d'élasticité macroscopique qui est isotrope. L'incrément de déformation plastique macroscopique se calcule donc par :

$$\underline{\underline{\Delta E}}_p(n-1) = \langle \underline{\underline{\varepsilon}}^C(n) \rangle_{N^c} - \langle \underline{\underline{\sigma}}^C(n) \rangle_{N^c} : (\underline{\underline{C}}^{Macro})^{-1} \quad (3.22)$$

La règle de transition d'échelle équation (2.30) est utilisée pour localiser le tenseur d'incrément de déformation macroscopique  $\underline{\underline{\Delta E}}(n)$  et cela donne le tenseur de déformation dans une cellule  $\underline{\underline{\Delta \varepsilon}}^C$  par l'équation suivante:

$$\underline{\underline{\Delta \varepsilon}}^C(n) = \frac{\mu^V}{\mu^V(1-\beta^V) + \mu^C\beta^V} \underline{\underline{\Delta E}}^{dev}(n) + \frac{1}{3} \frac{k^V}{k^V(1-\alpha^V) + k^C\alpha^V} Tr(\underline{\underline{\Delta E}}(n)) : \underline{\underline{I}} \quad (3.23)$$

La somme des incréments de déformation dans chaque cellule conduit au tenseur de déformation  $\underline{\underline{\varepsilon}}^C$  :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^C = \sum_1^{N^{inc}} \underline{\underline{\Delta \varepsilon}}^C(n) \quad (3.24)$$

où  $N^{inc}$  représente le nombre des incréments de charge nécessaire pour le calcul de  $\underline{\underline{\varepsilon}}^C$ .

Le tenseur de contrainte des cellules  $\underline{\underline{\sigma}}^C$  lui se calcule élastiquement à partir du tenseur de déformation  $\underline{\underline{\varepsilon}}^C$  en tenant compte de la plasticité de la cellule telle :

$$\underline{\underline{\sigma}}^C(n) = 2\mu^C(\underline{\underline{\varepsilon}}^C(n) - \underline{\underline{\varepsilon}}_p(n-1)) + (k^C - \frac{2\mu^C}{3})Tr(\underline{\underline{\varepsilon}}^C(n))\underline{\underline{I}} \quad (3.25)$$

Dans l'équation (3.25) la déformation plastique n'intervient pas dans la partie hydrostatique de la contrainte, car la plasticité est gouvernée par le cisaillement et elle n'influence que la partie déviatorique.

Une fois que le tenseur de contrainte est calculé pour une cellule, il permet de calculer la fonction de charge via l'équation (3.7). Si elle est négative, il n'y a pas de plasticité, mais si elle est positive, la déformation plastique des cellules se calcule par l'approche élastoplastique détaillée dans la section 3.1.3. Dans ce cas, la déformation plastique de chaque cellule sera calculée par les équations (3.13) et (3.19) qui donnent une déformation plastique avec un écrouissage linéaire isotrope dans la cellule.

*Convergence vers la consigne :*

Dans ce modèle d'élastoplasticité, les équations différentielles sont résolues par une approche explicite (Euler). Cela provoque une dépendance de la réponse du modèle AC à la valeur de l'incrément de chargement utilisé. Plus l'incrément de chargement est petit, plus la réponse du modèle converge vers la solution.

Ici aussi, comme pour des calculs en élasticité, la condition d'homogénéisation (2.37) doit être respectée et des facteurs de normalisation sont utilisés (section 2.3.4).

Pour que le modèle AC soit réaliste, il faut que la moyenne des composantes  $\sigma_{33}^C$  des contraintes de toutes les cellules soit égale à la consigne  $\Sigma^0$  étudiée. Cette condition est vérifiée à la fin de chaque incrément de la charge imposée (Éq. (2.43)). C'est important de préciser que cette condition est juste une condition de vérification pour assurer le niveau de contrainte étudiée à l'échelle macroscopique.

- 1) Si  $(\langle \sigma_{33}^C \rangle_{N^c}) < \Sigma^0$  : un nouvel incrément de contrainte macroscopique sera ajouté à l'AC.
- 2) Si  $(\langle \sigma_{33}^C \rangle_{N^c}) > \Sigma^0$  : la moyenne des contraintes des cellules sera réduite en multipliant l'incrément de la contrainte macroscopique avec un coefficient d'ajustement appelé « coefficient de convergence »  $Coeff_{Conv}$ . Ce coefficient est égal à 1 au départ et il est diminué de 0.001. Le nouvel incrément macroscopique diminué par le coefficient de convergence se localise dans les cellules et permet d'ajuster leurs contraintes afin de satisfaire la condition d'égalité (Éq.(2.43)). Si cette condition n'est toujours pas encore satisfaite, le coefficient d'ajustement diminue encore et la procédure se répète. L'équation (3.26) montre cette démarche.

$$\Delta \underline{\underline{\Sigma}}(n) = \Delta \underline{\underline{\Sigma}}(n) \times Coeff_{Conv} \quad \text{où} \quad 0 < Coeff_{Conv} < 1 \quad (3.26)$$

Pour minimiser le temps du calcul la précision, de la convergence est fixée à 0.01 MPa. C'est-à-dire, un calcul avec la moyenne des contraintes des cellules  $\pm 0,01$  MPa de la contrainte macroscopique étudiée est considéré convergé.

La validité de formulations mathématiques de ce modèle AC ainsi que l'effet d'incrément de chargement sont présentés et discutés en ANNEXE II pour deux microstructures homogène et hétérogène.

### 3.2 Chargement élastoplastique simulé par les ÉF

Le même agrégat utilisé pour les calculs ÉF en élasticité (section 2.4.2) est utilisé dans cette section aussi pour modéliser le comportement élastoplastique d'un alliage de titane. Cependant, le modèle mathématique utilisé en ÉF pour décrire le comportement élastoplastique est différent de celui utilisé en AC. En ÉF, les six systèmes de glissement basal et prismatique sont pris en compte et la loi d'écoulement est basée sur la vitesse de glissement cristallin. D'autre part, le tenseur d'élasticité et les cissions critiques basal et prismatique sont les mêmes valeurs qu'en AC et sont présentés dans la Tableau 2.1 et le Tableau 3.1, respectivement.

La contrainte dans chaque grain de l'agrégat est calculée comme :

$$\underline{\underline{\sigma}} = C : (\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}_p) \quad (3.27)$$

Le tenseur d'élasticité  $C$ : en ÉF reste anisotrope, tandis qu'en AC l'hypothèse de calculer les modules d'élasticité des cellules en fonction de l'angle  $\theta$ , pour rendre ce tenseur isotrope, mais hétérogène.

L'écrouissage est supposé être linéaire et peut s'écrire comme :

$$\tau_{CRSS} = \tau_0 + H \gamma_s^{cum} \quad (3.28)$$

où  $\tau_0$  est la cission critique initiale des systèmes de glissement basal et prismatique.  $\gamma_s^{cum}$  est le taux de glissement cumulé. La valeur du module plastique  $H$  n'est pas la même qu'en AC et il est égal à (voir ANNEXE II) :

$$H = 2500 \text{ MPa} \quad (3.29)$$

La loi d'écoulement peut être écrite comme :



$$d\underline{\underline{\varepsilon}}_p = \sum_s^6 d\gamma_s \underline{\underline{S}}_s^{ref} \quad (3.30)$$

où  $s$  signifie chaque système de glissement et  $\underline{\underline{S}}_s^{ref}$  est la matrice de Schmid de chaque système de glissement qui peut être calculée par l'équation (3.1).  $d\gamma_s$  est la vitesse de glissement et  $s$ 'obtient comme :

$$\frac{d\gamma_s}{dt} = \left( \frac{|\tau_s| - \tau_{CRSS}}{M} \right)^2 \text{sgn}(\tau_s) \quad (3.31)$$

où  $M$  est un paramètre avec une valeur faible ( $M \ll \tau_0$ ) pour rendre l'effet de la viscosité négligeable. La contrainte de cisaillement sur chaque système de glissement  $\tau_s$  se calcule en projetant la contrainte  $\underline{\underline{\sigma}}$  sur le système de glissement via la matrice de Schmid comme :

$$\tau_s = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{S}}_s^{ref} \quad (3.32)$$

Il est clair que si  $|\tau_s| < \tau_{CRSS}$  aucune plasticité ne se produit pas et le comportement de grain reste élastique.

Les sollicitations en ÉF, comme expliqué par avant, sont appliquées en imposant des conditions aux limites mixtes sur les faces de cube (agrégat). Pour un chargement uniaxial ces conditions aux limites contiennent de déplacement normal et de contrainte tangentielle nulle imposée sur l'agrégat.

### 3.3 Comparaison en élastoplasticité des simulations ÉF et AC

Pour comparer la réponse élastoplastique des AC avec celle des ÉF, les comportements de trois grains/cellules central(e)s avec des orientations cristallographiques figées sont étudiés dans deux voisinages différents. Le facteur de Kearns moyen du premier voisinage est égal à

0,678, ce qui correspond à une texture dure. Le deuxième voisinage possède un facteur de Kearns moyen de 0,269 ce qui correspond à un milieu mou. (Rappel : le facteur de Kearns moyen varie de 0 à 1 pour des milieux respectivement mou et dur, voir ANNEXE III). Le Tableau 3.2 illustre les orientations cristallographiques des cellules voisines des deux voisinages étudiés ainsi que leur facteur de Kearns moyens.

Tableau 3.2 Données cristallographiques des deux voisinages étudiés

	<b>Voisinage 1 (<math>\varphi_1, \phi, \varphi_2</math>)</b>	<b>Voisinage 2 (<math>\varphi_1, \phi, \varphi_2</math>)</b>
<b>Voisin 1</b>	127,37°, 54,21°, 158,17°	306,81°, 121,18°, 37,39°
<b>Voisin 2</b>	73,82°, 153,99°, 224,16°	177,29°, 92,5°, 66,28°
<b>Voisin 3</b>	217,4°, 40,88°, 5,01°	29,35°, 88,29°, 340,9°
<b>Voisin 4</b>	271,81°, 157,85°, 326,07°	71,23°, 42,63°, 308,48°
<b>Voisin 5</b>	201,65°, 137,51°, 108,93°	32,96°, 83,28°, 189,45°
<b>Voisin 6</b>	353,9°, 155,51°, 358,19°	114,87°, 149,34°, 326,98°
<b>Facteur de Kearns <math>f_K</math> moyenne</b>	0,678	0,269

Le Tableau 3.3 illustre les orientations étudiées en élastoplasticité dans cette étude. L'orientation 1 (0°,90°,15°) est définie pour favoriser le glissement prismatique maximal ( $f_{Sch}^{Prism} = 0,5$ ). La deuxième orientation (0°,45°,30°) donne un facteur de Schmid basal maximal ( $f_{Sch}^{Basal} = 0,5$ ) et la troisième orientation (0°,45°,0°) possède un facteur de Schmid basal égal à 0,433.

Tableau 3.3 Orientations étudiées

	<b>Ori.1 (0°,90°,15°)</b>	<b>Ori.2 (0°,45°,30°)</b>	<b>Ori.3 (0°,45°,0°)</b>
<b>Voisinage 1</b>	×	×	×
<b>Voisinage 2</b>	×	×	×

Pour chaque paire de grain/cellule central(e) et son voisinage, sept calculs en AC et en ÉF sont effectués. Pour chaque calcul, l'orientation de grain/cellule central(e) et son voisinage dans la microstructure générée par les AC et l'agrégat en ÉF sont fixés et les orientations cristallographiques de grains/cellules restant(e)s changent.

En AC, des tenseurs d'incrément de contrainte (Éq. (3.20)) sont imposés macroscopiquement à la microstructure jusqu'à ce que la moyenne de contraintes de toutes les cellules soit égale à 977,5 MPa. Le même niveau de contrainte macroscopique est aussi atteint en ÉF.

La Figure 3-4 montre la comparaison du comportement élastoplastique obtenu pour sept réalisations en AC et ÉF, à l'échelle macroscopique. On note que l'AC donne des réponses très proches à celles obtenues par les ÉF. Pour les deux modèles, une certaine dispersion de la réponse élastoplastique est observée. Cela est dû aux orientations cristallographiques aléatoires des grains/cellules générées pour chaque réalisation.

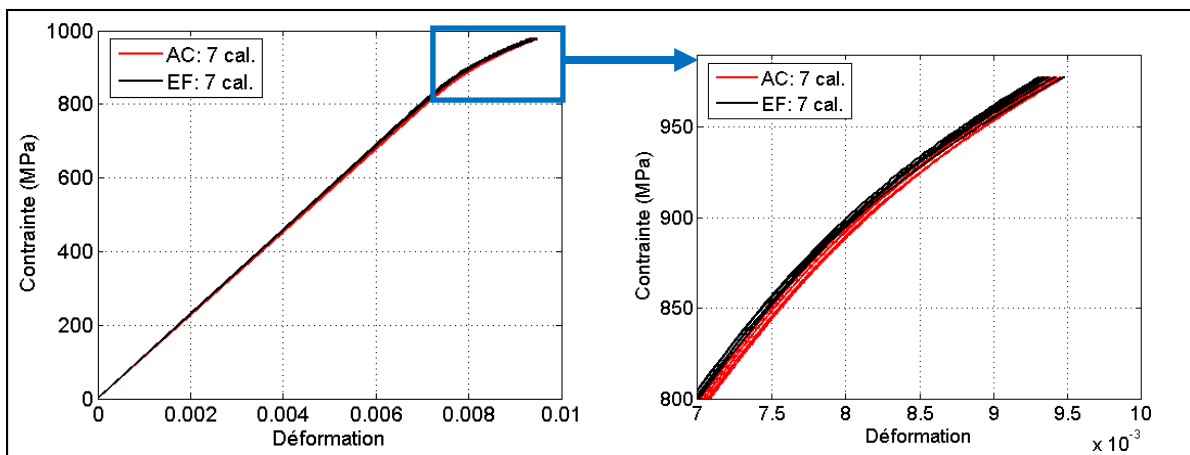


Figure 3-4 Comportement élastoplastique macroscopique de 7 réalisations en AC et en ÉF (agrandis à droite)

La Figure 3-5 montre la comparaison du comportement élastoplastique de la première orientation ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) en AC et en ÉF pour les deux voisinages. Les courbes continues représentent les réponses du modèle AC et les courbes pointillées correspondent aux calculs ÉF. On note que les résultats obtenus par AC sont comparables avec ceux d'ÉF. L'effet du voisinage est clair sur cette figure. Pour les deux modèles, le niveau de contrainte et de déformation de cellule ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) est plus important quand elle est entourée par un voisinage dur (voisinage 1). Comme il a été mentionné, cela est dû au fait que la déformation dans une inclusion est pilotée plus par la matrice que par l'inclusion. Donc, quand une inclusion est entourée par un milieu dur, elle se déforme plus et inversement, la déformation

est moins importante dans une inclusion entourée par un milieu mou. C'est pourquoi, ici, la déformation dans la cellule ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) est plus importante quand elle est plongée dans le premier voisinage. La contrainte est la conséquence de cette déformation, donc, elle est aussi plus élevée dans la cellule pour le premier voisinage.

Sur cette figure, on constate aussi que pour le même voisinage, la réponse des ÉF est plus dispersée que les AC. Cela est dû au fait que le comportement mécanique du grain en ÉF est influencé pas seulement par les voisins immédiats, mais aussi par d'autres grains de l'agrégat. Dans la version actuelle de l'AC, le comportement de la cellule centrale ne dépend que des comportements de ses 6 voisins immédiats et étant donné que le voisinage est figé, le comportement de la cellule ne peut pas varier d'un essai à l'autre.

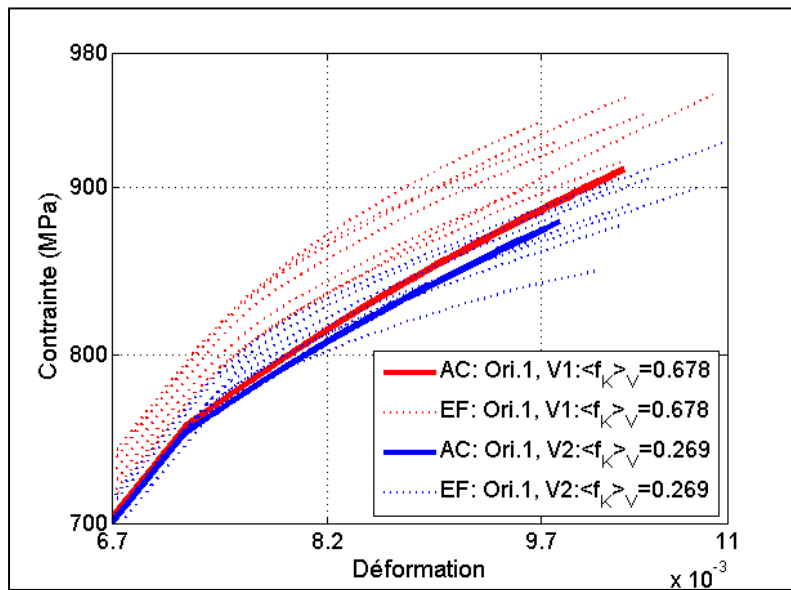


Figure 3-5 Comparaison de  $\sigma_{33}$  de la cellule ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) en fonction de  $\varepsilon_{33}^C$  pour 7 réalisations en AC et ÉF et deux voisinages

Étant donné que la loi élastoplastique utilisée en AC est 3D, il est intéressant d'étudier d'autres composantes du tenseur de contrainte. La Figure 3-6 illustre les contraintes  $\sigma_{11}$  et  $\sigma_{22}$  du tenseur de contrainte dans la cellule ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) pour 7 réalisations en AC et ÉF. On

constate qu'en AC  $\sigma_{11} = \sigma_{22}$ , ce qui n'est pas valide pour les ÉF. En effet, dans l'AC, les propriétés mécaniques des cellules ont été calculées de façon isotrope, ce qui conduit à des tenseurs d'élasticité isotropes et se manifeste par l'égalité des composantes 11 et 22 du tenseur de contrainte et de déformation. Par contre, en ÉF, aucune hypothèse n'est pas faite et le comportement des grains est anisotrope. Ce résultat montre aussi que l'état de contrainte en AC est non radial même s'il est isotrope et que des contraintes assez importantes sont générées dans les autres axes que celui de la sollicitation.

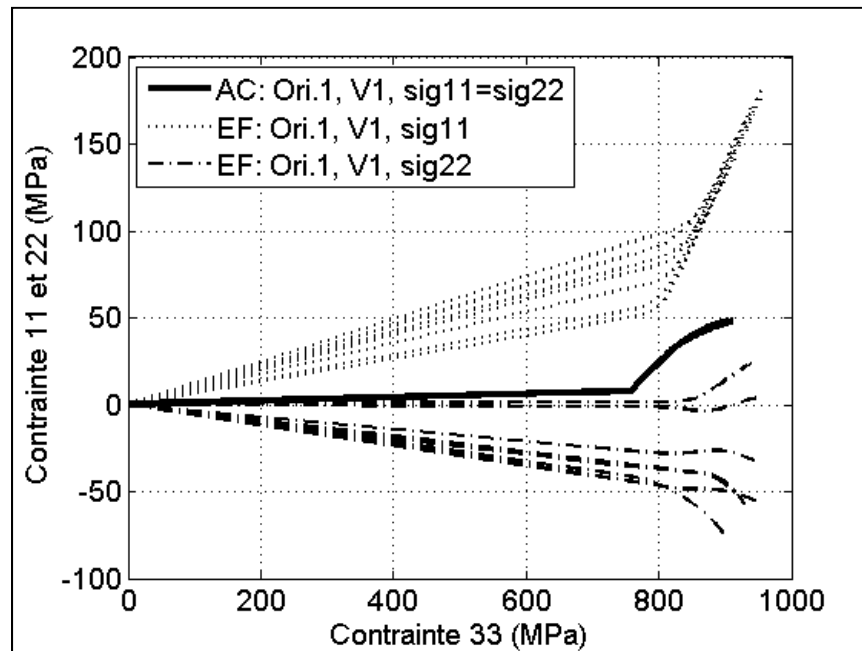


Figure 3-6 Comparaison des  $\sigma_{11}$  et  $\sigma_{22}$  du tenseur de contrainte en fonction de  $\sigma_{33}$  pour l'orientation ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) en AC et ÉF

La moyenne de composantes 11 et 22 du tenseur de contrainte de la première orientation en fonction de la composante 33 est illustrée dans la Figure 3-7. On remarque que l'isotropie dans les AC résulte à des valeurs intermédiaires de  $\sigma_{11} = \sigma_{22}$  qui peuvent être comparées avec la moyenne de  $\sigma_{11}$  et  $\sigma_{22}$  en ÉF.

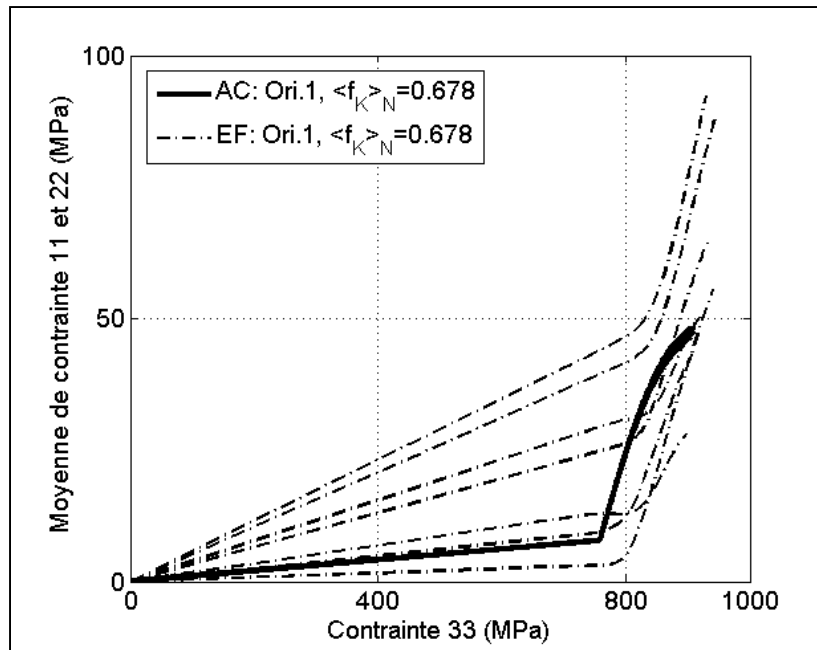


Figure 3-7 Comparaison des moyennes des  $\sigma_{11}$  et  $\sigma_{22}$  du tenseur de contrainte en fonction de  $\sigma_{33}$  pour l'orientation ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) en AC et ÉF

Pour étudier l'effet de l'orientation, les comportements des deux premières orientations plongées dans le premier voisinage sont comparés dans la Figure 3-8. Le modèle AC donne des courbes comparables avec celles des ÉF. On constate que la déformation est plus importante pour l'orientation prismatique ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) par rapport à l'orientation basale ( $0^\circ, 45^\circ, 30^\circ$ ). Cela est dû au fait que pour l'orientation prismatique la cission critique est inférieure de celle de l'orientation basal. En conséquence, la contrainte est plus élevée pour l'orientation basale.

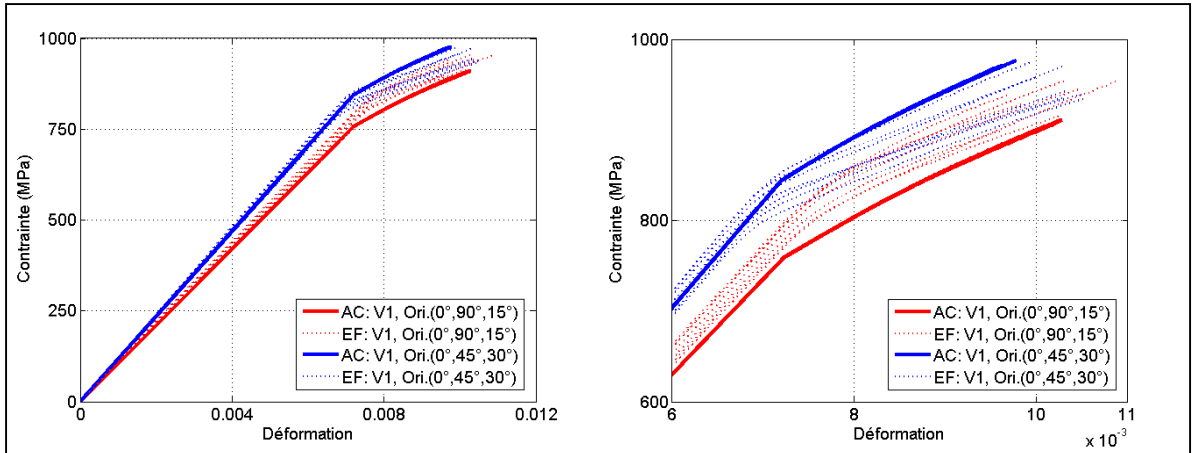


Figure 3-8 Comparaison de  $\sigma_{33}$  des deux premières orientations en fonction de  $\varepsilon_{33}$  pour 7 réalisations en AC et ÉF et premier voisinage (figure agrandi à droite)

Dans les AC, les deux orientations commencent à plastifier au même niveau de déformation. Cela est la conséquence de l'ajustement des cissions critiques expliqué au début de la section 3.1.2. À l'inverse, pour un niveau de déformation constant, le comportement élastoplastique en ÉF est dispersé. Comme mentionnée précédemment, cette dispersion peut être due à la manière dont le voisinage est défini dans les deux modèles.

En regardant la Figure 3-8 de façon plus précise, on réalise que pour l'orientation basale ( $0^\circ, 45^\circ, 30^\circ$ ), les ÉF prédisent une déformation plastique précoce par rapport les AC. Cela conduit à un écart important de contrainte entre les deux modèles. Pour comprendre l'origine de cette plasticité précoce les autres composantes du tenseur de contrainte ont été tracées et illustrées dans la Figure 3-9. On constate qu'en ÉF la composante 22 change son comportement à un niveau de contrainte autour de 690 MPa. Cela montre que la composante 22 du tenseur de contrainte joue un rôle essentiel dans la plasticité. En effet, en ÉF, au contraire des AC, plusieurs systèmes de glissement peuvent s'activer et la cission critique est gouvernée par la matrice de Schmid et calculée par l'équation (3.33).

$$\tau_s = \sigma_{11} f_{11}^{Sch} + \sigma_{22} f_{22}^{Sch} + \sigma_{33} f_{33}^{Sch} \quad (3.33)$$

Pour cette orientation  $f_{11}^{Sch} = 0$ ,  $f_{22}^{Sch} = -0,5$ ,  $f_{33}^{Sch} = 0,5$  et le facteur de Schmid négatif maximal dans la direction 22, diminue la cission critique et conduit plus facilement à l'initiation de la plasticité. Dans l'AC un seul facteur de Schmid est considéré et les autres composantes du tenseur de contrainte n'influencent pas le seuil de déformation plastique.

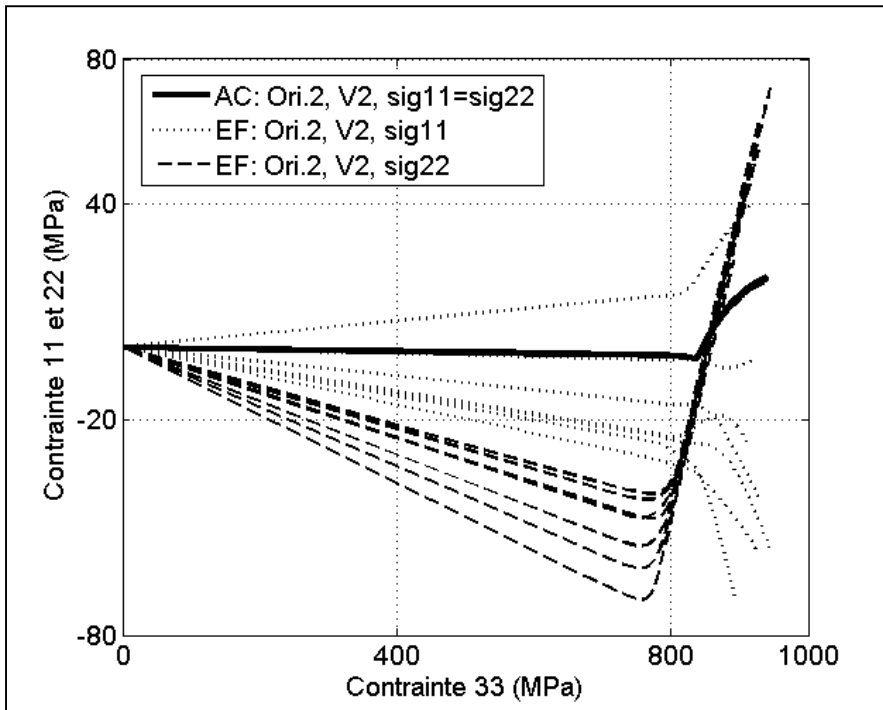


Figure 3-9 Comparaison entre  $\sigma_{11}$  et  $\sigma_{22}$  du tenseur de contrainte en fonction de  $\sigma_{33}$  pour l'orientation (0°,45°,30°) en AC et ÉF

Pour mieux documenter le fait que la déformation plastique précoce en ÉF est due à l'influence d'une autre composante du tenseur de contrainte, sept calculs sur la troisième orientation (0°,45°,0°) sont effectués. La comparaison des composantes 22 et 33 entre AC et ÉF est illustrée dans la Figure 3-10. Les courbes continues et pointillées représentent respectivement les calculs en AC et ÉF. On note que pour l'orientation (0°,45°,0°), le changement du comportement caractérisé par  $\sigma_{22}$  arrive plus tard par rapport l'orientation (0°,45°,30°). En effet, pour l'orientation (0°,45°,0°) les autres composantes de la matrice de Schmid ne sont pas trop élevées pour provoquer une plasticité relativement tôt.



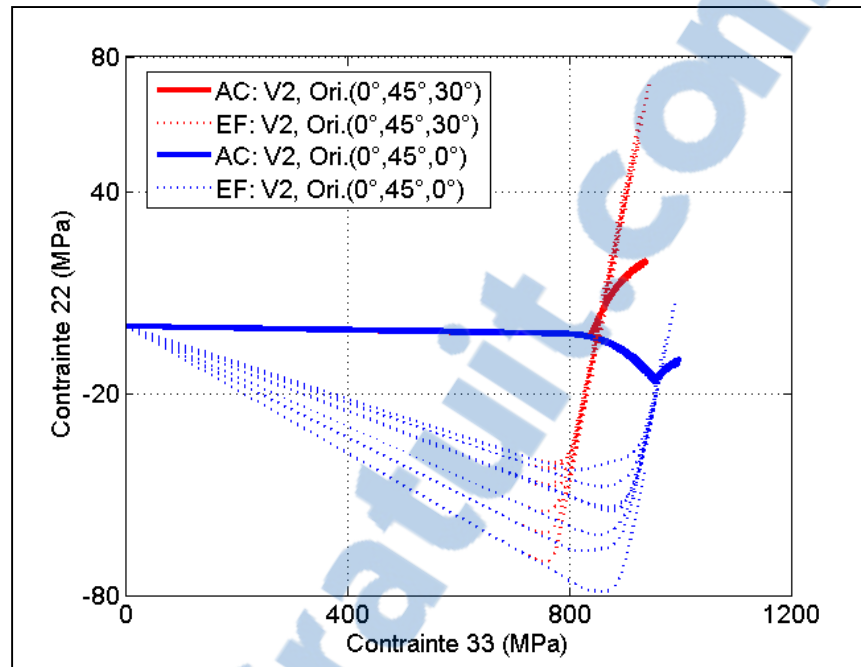


Figure 3-10 Comparaison entre  $\sigma_{22}$  du tenseur de contrainte des deux orientations  $(0^\circ, 45^\circ, 30^\circ)$  et  $(0^\circ, 45^\circ, 0^\circ)$  en fonction de  $\sigma_{33}$  en AC et ÉF

#### Distribution des contraintes et des déformations dans une microstructure non texturée :

La Figure 3-11 illustre la distribution de déformation plastique dans 900 cellules d'une microstructure en AC en fonction de l'angle  $\theta$  pour une traction uniaxiale de 977,5 MPa. Chaque point sur cette figure représente une cellule. On remarque que le niveau de déformation plastique le plus élevé correspond aux cellules orientées à  $90^\circ$  et  $45^\circ$  par rapport l'axe du chargement. Les cellules défavorablement orientées ( $0^\circ$  à  $20^\circ$ ) ne se déforment pas. Certaines cellules comme celles ayant des angles  $\theta$  autour de  $20^\circ$  et  $60^\circ$  peuvent commencer la déformation à des niveaux de contraintes plus élevées. Pour un angle  $\theta$  donné, on constate une dispersion de déformation plastique liée au voisinage.

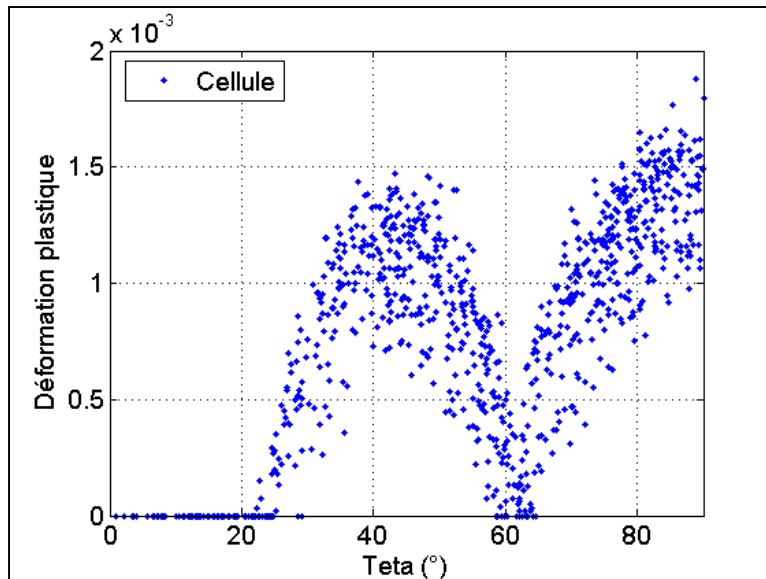


Figure 3-11 Distribution de déformation plastique en fonction de l'angle  $\theta$  pour un AC de 900 cellules

La Figure 3-12 montre la distribution des contraintes de ces mêmes 900 cellules en fonction de  $\theta$ . Cette distribution gouvernée par l'anisotropie élastique a la forme générale présentée dans la Figure 2-6. Les résultats en contrainte sont en accord avec ceux en déformation, c'est-à-dire que le niveau de contrainte le plus élevé correspond aux cellules subissant la déformation plastique la plus faible et inversement, la contrainte est faible dans les cellules déformées. Ici aussi, on constate une dispersion guidée par le voisinage pour un angle  $\theta$  constant.

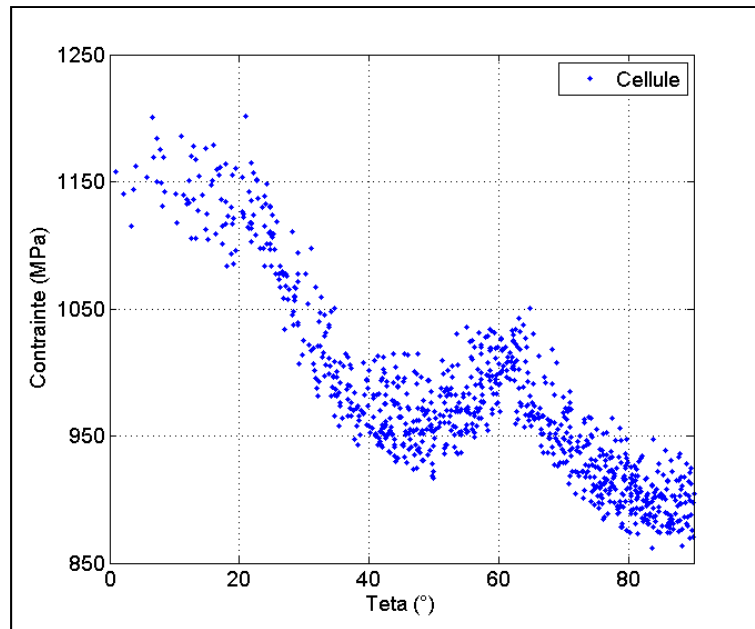


Figure 3-12 Distribution de  $\sigma_{33}$  dans les cellules en fonction de l'angle  $\theta$  pour un AC de 900 cellules

### 3.4 Calculs des contraintes résiduelles

À la fin d'un essai de traction, quand la charge macroscopique est enlevée de la microstructure, les contraintes résiduelles (contraintes locales à la fin de décharge) dans les grains ne sont pas nulles. Ces contraintes résiduelles qui sont de nature élastique restent dans les grains malgré le fait que la microstructure ne subit aucune charge macroscopiquement. Elles interviendront lors d'un prochain chargement et la prise en compte des contraintes résiduelles lors d'un chargement cyclique est indispensable.

Dans cette section, des essais de traction élastoplastique sont modélisés afin d'étudier les contraintes résiduelles pour deux orientations cristallographiques extrêmes. L'étape de chargement est simulée par un comportement élastoplastique tel que présenté dans les sections précédentes et l'étape de décharge est supposée purement élastique. Finalement, les résultats du modèle AC sont confrontés avec ceux des ÉF où les contraintes résiduelles sont calculées naturellement sans aucune hypothèse.

### 3.4.1 Montée en charge élastoplastique

Les détails du chargement élastoplastique en AC ont été discutés précédemment dans la section 3.1. En résumé, des tenseurs d'incrément de déformation macroscopique sont calculés à partir des tenseurs d'incrément de contrainte imposée. Ces tenseurs de déformation se localisent dans les cellules en seule étape par la règle de transition d'échelle (3.23). La règle de transition d'échelle calcule les champs de contrainte et de déformation dans les cellules. À la fin de la charge, grâce à un coefficient d'ajustement, le modèle assure que la moyenne de contrainte de toutes les cellules est égale à la consigne (Éq.(2.43)). La démarche du chargement élastoplastique dans le modèle des ÉF est détaillée dans la section 3.2.

### 3.4.2 Décharge élastique

Dans les deux modèles AC et ÉF, le même processus utilisé pour montée en charge est utilisé pour la décharge aussi mais avec deux différences majeurs : 1) La décharge est supposée complètement élastique. 2) Des incréments de contrainte négative macroscopique sont imposés à la microstructure/agrégat pour arriver à une contrainte macroscopique nulle. À la fin de la décharge, les deux modèles assurent la satisfaction de la condition de décharge où la contrainte macroscopique (la moyenne des contraintes de tous les cellules/grains) devient nulle (Éq.(3.34)). Pour satisfaire cette condition en AC, un coefficient d'ajustement est utilisé.

$$\langle \sigma_{33}^c \rangle_{N^c} = 0 \quad (3.34)$$

À l'échelle locale, les contraintes et les déformations ne sont pas nulles et elles dépendent du comportement de chaque cellule et de leur environnement qui peuvent varier.

### 3.4.3 Comparaison des simulations ÉF et AC en charge-décharge

Dans cette étude, 44 calculs en charge-décharge sont effectués par les deux modèles sous un niveau de contrainte de 977,5 MPa. Pour chaque calcul l'orientation de cellule/grain

central(e) est gardée constante et les orientations des cellules/grains restant(e)s varient aléatoirement. Le comportement de cellule/grain central(e) est étudié pour deux orientations ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) et ( $0^\circ, 45^\circ, 30^\circ$ ). Deux orientations extrêmes sont étudiées ici; 1) l'orientation prismatique ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ) avec un facteur de Schmid prismatique maximal et 2) l'orientation basal ( $0^\circ, 45^\circ, 30^\circ$ ) qui possède un facteur de Schmid basal maximum. Puisque les orientations sont favorables pour la déformation, on attend qu'elles se déforment et se trouvent en compression à la fin de la décharge.

La Figure 3-13 illustre les courbes contrainte-déformation macroscopiques de 44 calculs effectués en AC sur des microstructures non texturées. On note la dispersion des courbes du au tirage aléatoire des orientations cristallographiques des cellules.

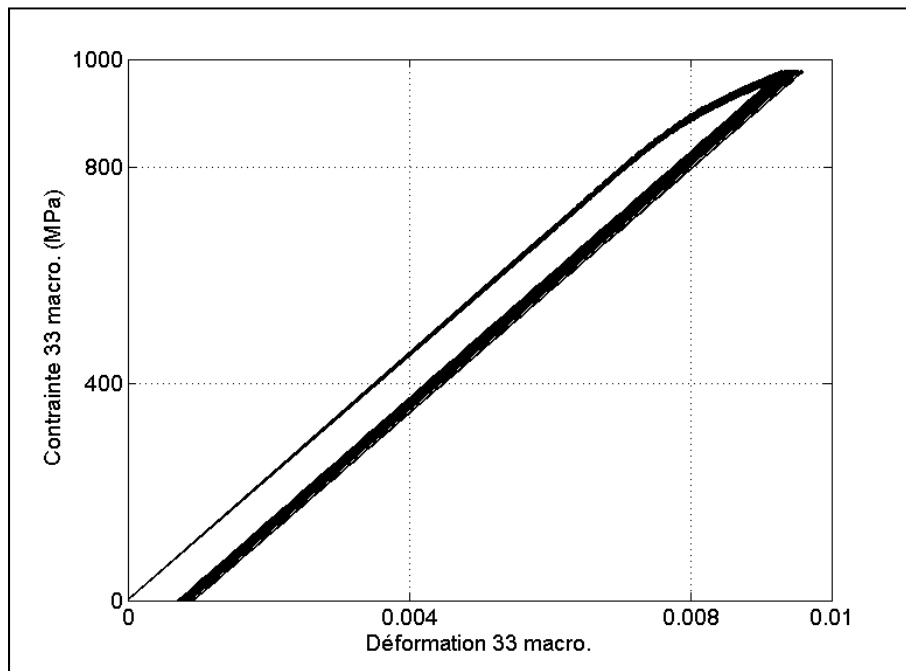


Figure 3-13 44 Calculs en charge-décharge macroscopique en AC sous une contrainte imposée de 977,5 MPa

La Figure 3-14 et la Figure 3-15 illustrent des comparaisons entre les 44 calculs élastoplastiques en AC et ÉF pour les deux orientations choisies, respectivement. À la fin de la charge, l'AC prévoit des contraintes et des déformations comparables avec celles d'ÉF pour l'orientation ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ). Cependant, les ÉF prédisent une déformation plastique

précoce par rapport les AC pour l'orientation basal ( $0^\circ, 45^\circ, 30^\circ$ ), ce qui augmente le niveau de déformation calculé par ÉF pour cette orientation. Cela, comme discuté dans la section 3.3, est dû à l'activation de plusieurs systèmes de glissement dans le modèle ÉF. Ainsi, pour un niveau de déformation donné, les résultats du modèle ÉF sont plus dispersés par rapport au modèle AC pour les deux orientations étudiées. Cela est principalement dû à la manière dont le voisinage est géré dans les deux modèles (voir section 3.3).

On constate qu'à la fin de décharge les deux orientations sont en compression et le modèle AC donne des estimations proches de celles d'ÉF. Cependant, pour des raisons déjà discutées dans le chapitre précédent, l'AC prévoit moins de dispersions par rapport les ÉF. D'autre part, un décalage des résultats d'AC par rapport ceux des ÉF peut être observé en décharge pour l'orientation basal ( $0^\circ, 45^\circ, 30^\circ$ ). Cela, comme mentionné dans le chapitre précédent, est dû à la déformation plastique précoce dans le modèle ÉF gouverné par les systèmes de glissement activés dans la direction 22. Ce décalage est plus visible dans la Figure 3-17.

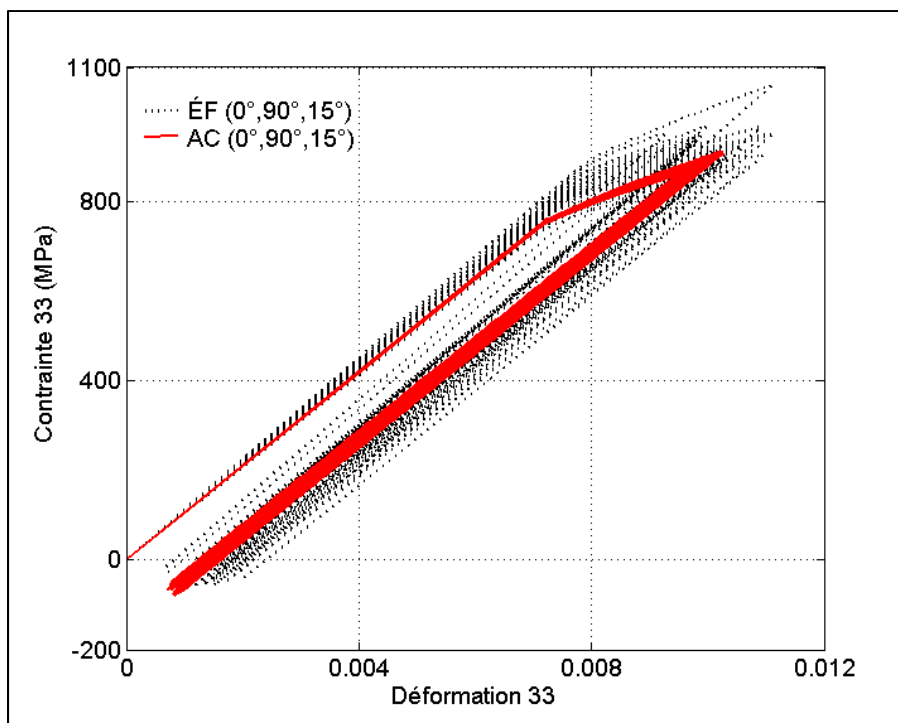


Figure 3-14 Comparaison de 44 calculs en charge-décharge en AC et ÉF pour l'orientation ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ )

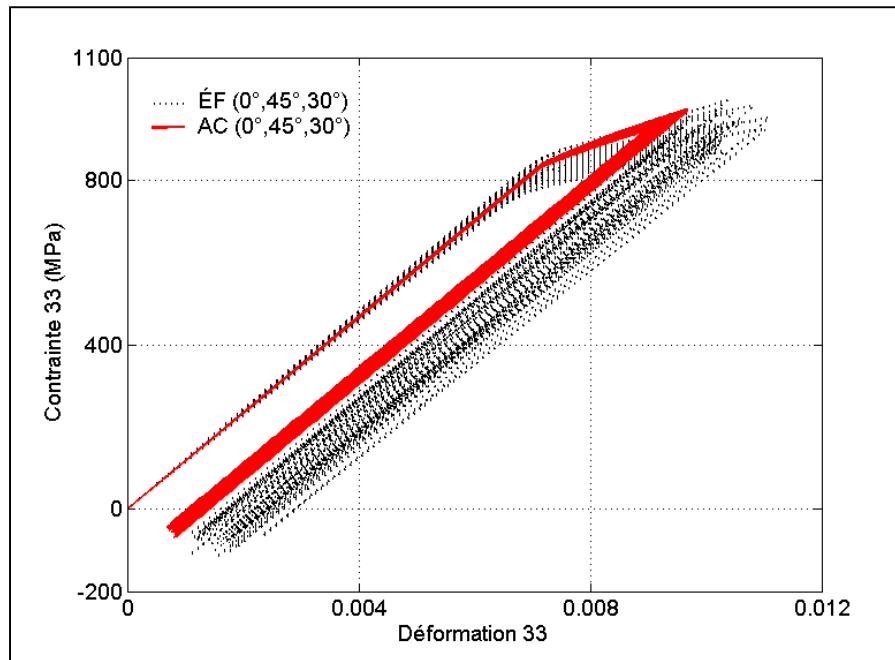


Figure 3-15 Comparaison de 44 calculs en charge-décharge en AC et EF pour l'orientation (0°,45°, 30°)

Le Tableau 3.4 présente la comparaison des moyennes et des écart-types des contraintes résiduelles dans les deux modèles. Les écarts-types sont plus élevés en EF par rapport l'AC due à la faible dispersion des contraintes résiduelles en AC. La faible dispersion en AC, comme expliqué dans le chapitre précédent, est la conséquence de l'hypothèse de définir la matrice par seulement six cellules voisines.

Tableau 3.4 Comparaisons des moyennes des contraintes résiduelles et des écart-types entre les modèles AC et EF

		Ori.1 (0°,90°,15°)	Ori.2 (0°,45°,30°)
<b>Moyenne</b> (MPa)	AC	-60	-48
	EF	-33	-67
<b>Écart-type</b> (MPa)	AC	8	6
	EF	16	21

Pour mieux comparer les résultats des deux modèles AC et EF, les déformations à la fin de la charge et la décharge sont tracées en fonction de facteur de Kearns du voisinage. La Figure

3-16 et la Figure 3-17 illustrent les comparaisons en déformation des 44 calculs, pour les deux orientations prismatique et basal, respectivement. En AC, la relation linéaire entre la cellule et son voisinage peut être observée pour les deux orientations. Dans la Figure 3-17, on peut mieux voir que les résultats d'AC pour l'orientation basale sont décalés par rapport à ceux d'ÉF en terme de déformation en charge et en décharge. Cette figure montre aussi que les déformations à la fin de décharge sont plus élevées que celles des ÉF pour cette orientation.

Les contraintes de charge et les contraintes résiduelles obtenues par les deux modèles sont comparées dans la Figure 3-18 et la Figure 3-19 pour l'orientation prismatique et basale, respectivement. En comparaison avec les ÉF, les contraintes résiduelles estimées par le modèle AC semblent être plus élevées pour l'orientation prismatique et moins élevées pour l'orientation basale. Cela est peut être dû à l'activation de plus d'un système de glissement dans le modèle ÉF par rapport au modèle AC où un seul système de glissement est modélisé.

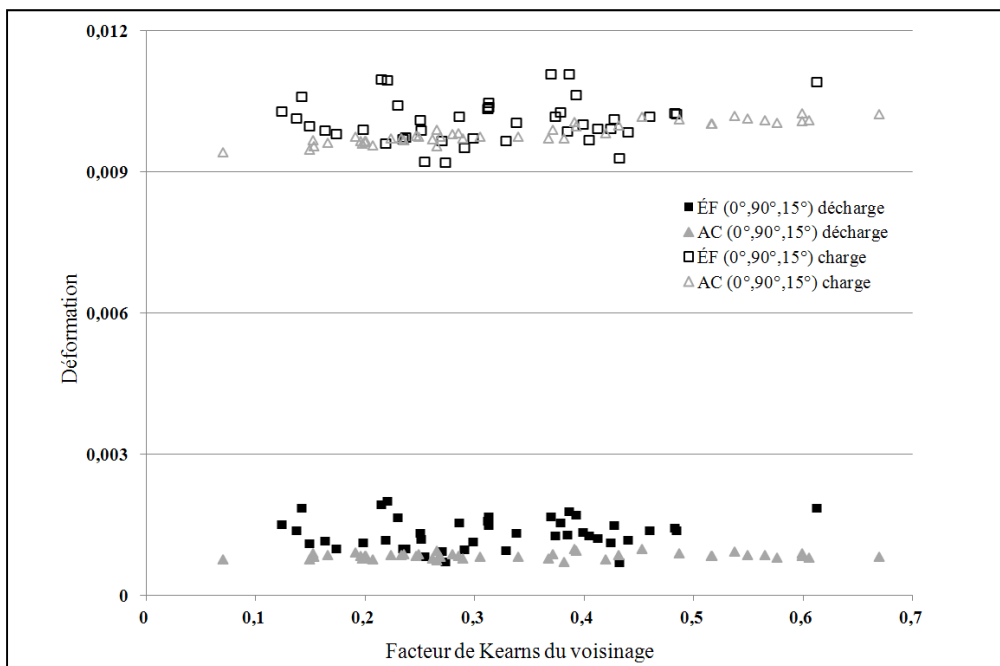


Figure 3-16 Comparaison de la déformation locale en charge-décharge pour l'orientation (0°,90°,15°) en AC et ÉF



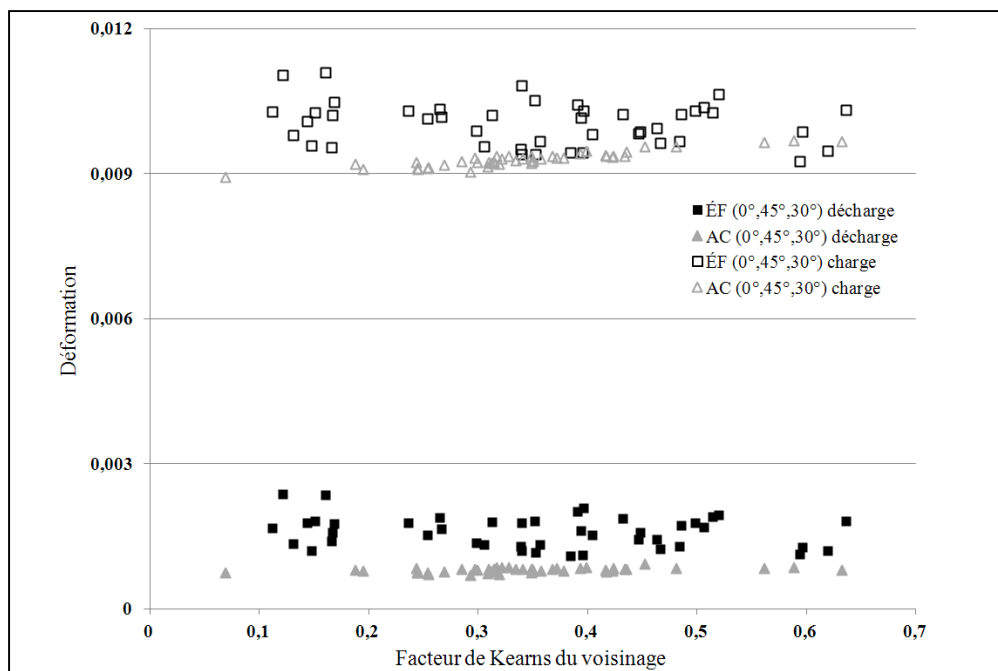


Figure 3-17 Comparaison de la déformation locale en charge-décharge pour l'orientation (0°, 45°, 30°) en AC et ÉF

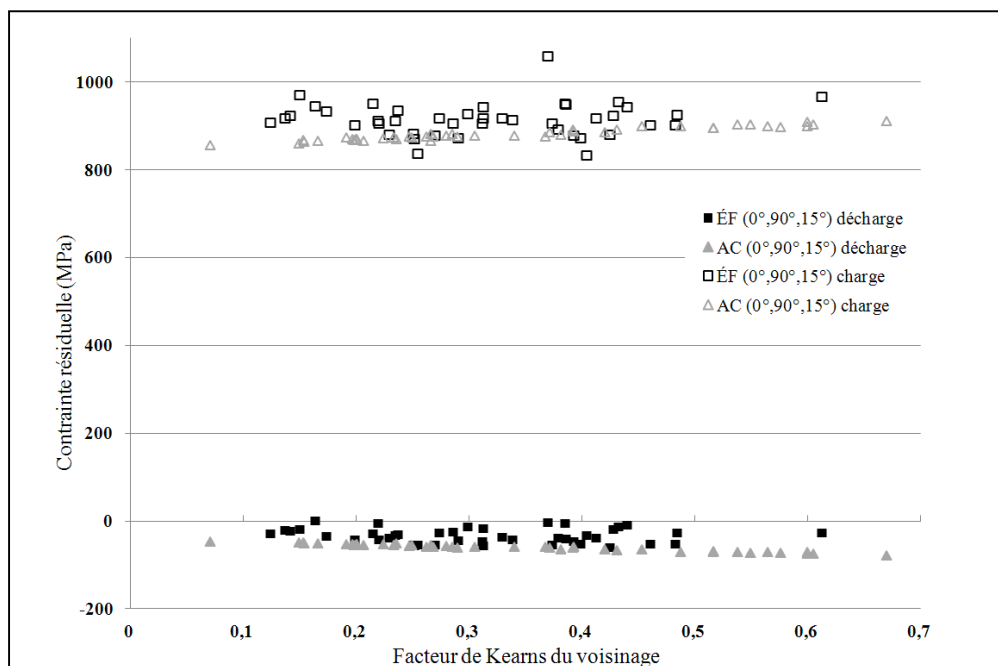


Figure 3-18 Comparaison de la contrainte locale en charge-décharge pour l'orientation (0°, 90°, 15°) en AC et ÉF

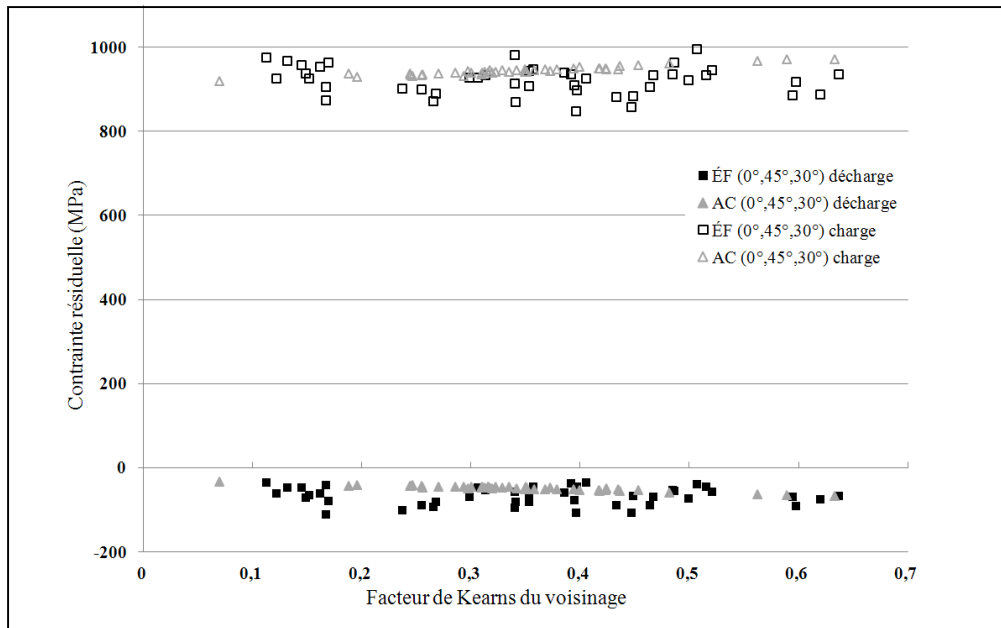


Figure 3-19 Comparaison de la contrainte locale en charge-décharge pour l'orientation (0°,45°,30°) en AC et ÉF

Le modèle AC donne des résultats proches à ceux d'ÉF en terme de contrainte résiduelle. Malgré que les hypothèses simplificatrices des AC écartent ses résultats par rapport les résultats des ÉF, ces écarts restent acceptables. La méthode de calcul des contraintes résiduelles expliquées dans cette section va être utilisée dans le prochain chapitre pour modéliser le comportement cyclique des alliages de titane.

### 3.5 Conclusion

Dans ce chapitre, le comportement élastoplastique 3D d'une microstructure non texturée d'un alliage de titane a été modélisé et comparé avec des calculs d'agrégat en ÉF. En regardant les détails des résultats des deux modèles, on constate que les résultats obtenus par les AC sont très similaires de ceux des ÉF malgré les choix des hypothèses simplificatrices en AC. Pour une contrainte macroscopique imposée de 977,5 MPa, le temps de calcul élastoplastique en AC est une minute pour 900 cellules modélisées et il est autour de 9 heures en ÉF pour 343 grains simulés. Cette comparaison montre les avantages du modèle AC au niveau du temps et le nombre des grains modélisés. D'autre part, les calculs en ÉF ont été effectués par des

moyens informatiques efficaces tandis que les calculs en AC sont effectués sur des postes informatiques standards.

En élastoplasticité, l'effet du voisinage et celui de l'orientation sont étudiés. Les AC donnent des estimations proches à celles des ÉF. Le choix d'un seul système de glissement cause un écart entre les résultats d'AC et ceux d'ÉF. Ainsi, la dispersion du comportement en ÉF pour une déformation constante n'apparaît pas en AC due au choix du voisinage.

Vis-à-vis d'autres méthodes de calcul comme les approches à champs moyen qui ne donnent pas des informations sur le voisinage, la méthode des AC permet de traiter toutes les informations des grains voisins du grain central. Cela est un avantage important de cette méthode qui peut être un bon outil pour étudier le comportement microstructural des matériaux. Le modèle AC peut être développé pour analyser le comportement mécanique des microstructures texturées et aussi étudier l'effet du voisinage de second ordre. Ce modèle peut être aussi développé pour d'autres matériaux.



## CHAPITRE 4

### MODÉLISATION DU CHARGEMENT EN DWELL-FATIGUE

Les objectifs de ce chapitre se divisent en deux composantes: 1) modéliser le comportement élastoviscoplastique d'un alliage de titane sollicité en dwell-fatigue afin de déterminer l'influence des hétérogénéités microstructurales cristallographiques sur l'accumulation de la déformation plastique; 2) étudier la capacité du modèle AC à identifier les configurations cristallographiques critiques pour l'amorçage de fissures selon différents critères d'endommagement.

Les microstructures des alliages de titane modélisés dans ce travail subissent un chargement dwell-fatigue à la température ambiante et dans le domaine de la fatigue poly et oligocyclique. Le niveau de la charge étudié varie de 800 MPa à 936 MPa ( $\approx 80$  à  $90\%$  de la limite d'élasticité conventionnelle). La limite d'élasticité conventionnelle de l'alliage Ti-6Al-4V est 950 MPa (Bridier, 2008). Le niveau de déformation plastique cumulée dans les conditions typiques de service est de l'ordre de  $1\%$  pour ces alliages. Le modèle développé ici doit reproduire ce comportement à l'échelle macroscopique, mais également identifier comment se distribue cette accumulation de déformation plastique à l'échelle microscopique.

Au début de ce chapitre, le chargement dwell-fatigue est décomposé en trois composantes (charge, maintien en charge maximale et décharge) et le détail de chacune est développé. Par la suite, deux approches mathématiques pour modéliser le comportement des alliages de titanes en dwell-fatigue sont introduites. Des résultats macroscopiques et microscopiques sont utilisés par ces deux approches et l'approche la plus adaptée est choisie pour le reste de cette étude. Ensuite, les déformations inélastiques, les contraintes à la charge et les contraintes résiduelles des cellules sont exploitées. Des études sur l'effet du temps de maintien et la capacité du modèle AC à modéliser un grand nombre des cellules sont effectuées. À la fin de ce chapitre, les possibilités du modèle AC à détecter des cellules critiques selon des critères d'endommagement sont discutées.

Il faut noter que dans ce chapitre le comportement mécanique est modélisé de façon unidimensionnelle. Ainsi, seules les contraintes et les déformations dans la direction de la charge sont étudiées.

## **4.1 Décomposition du chargement en fatigue-fluage**

Chaque cycle du chargement dwell-fatigue consiste en une montée en charge, un maintien à cette charge maximale et puis une décharge. Ces trois étapes ont été modélisées dans cette étude afin de reproduire ce chargement. L'étape de charge est modélisée par un chargement élastoplastique avec l'écrouissage isotrope linéaire discuté dans le chapitre précédent. L'étape du maintien en charge est modélisée par un chargement en fluage et elle sera détaillée dans ce chapitre. Finalement, la décharge est supposée être purement élastique. Les démarches de modélisation de ces trois étapes et leurs structures mathématiques sont présentées dans cette section.

### **4.1.1 Charge élastoplastique**

En cours de service, une pièce en alliage de titane subissant un chargement autour de 90% de sa limite d'élasticité conventionnelle peut voir certains grains subir de la déformation plastique à l'échelle microscopique. Cela peut être dû au fait que certains grains sont favorablement orientés pour la déformation et également à l'influence de leur voisinage qui peut favoriser leurs déformations plastiques. Le modèle AC développé ici doit reproduire ces comportements à l'échelle microscopique ainsi qu'à l'échelle macroscopique.

Les détails du chargement élastoplastique sont similaires à ceux déjà présentés dans la section 3.1.3 mais ils sont écrits ici pour un comportement 1D. Le même écrouissage et la même loi d'écoulement sont utilisés et la fonction de charge est écrite comme :

$$f(\sigma, R) = |\sigma| - (\sigma_y^c + R) \quad (4.1)$$

où  $\sigma$  est la contrainte de chaque cellule,  $\sigma_y^C$  est le seuil initial de la plasticité et  $R$  est l'écroutissage isotrope défini par l'équation (3.9).

Pour décrire l'évolution de la surface de charge au cours de la plasticité, la condition de cohérence ( $f = 0$  et  $df = 0$ ) doit être satisfaite, donc :

$$\frac{\partial f}{\partial \sigma} d\sigma + \frac{\partial f}{\partial R} dR = 0 \quad (4.2)$$

Soit :

$$\text{sgn}(\sigma)d\sigma + (-1)Hdp = 0 \quad (4.3)$$

Grâce à la loi d'écoulement utilisée dans le chapitre précédent (Éq. (3.13)) et l'égalité de l'équation (3.15), on obtient :

$$d\varepsilon_p = dp \text{sgn}(\sigma) \quad (4.4)$$

En plaçant l'équation (4.4) dans l'équation (4.2) et en écrivant  $d\sigma = E(d\varepsilon - d\varepsilon_p)$ , on obtient l'incrément de la déformation plastique comme :

$$d\varepsilon_p = \frac{E}{E+H} d\varepsilon \quad (4.5)$$

Il faut rappeler que la solution d'Eshelby est utilisée pour la localisation des incréments de charge macroscopique. Ainsi, à la fin du chargement, le modèle AC assure que la moyenne des contraintes de toutes les cellules est égale à la contrainte macroscopique étudiée.

### 4.1.2 Temps de maintien

Avant de présenter les lois de comportement en fluage utilisées pour la modélisation du comportement des cellules lors du temps de maintien, deux aspects importants de simulation doivent être détaillés.

Le premier est l'effet du voisinage qui doit être pris en compte pendant le fluage. Étant donné que le fluage est simulé à l'échelle des cellules et que chaque cellule fait partie elle-même de voisinages, l'effet du voisinage modifie la contrainte locale des cellules et affecte la contrainte de fluage macroscopique. Or, cette dernière est supposée maintenue constante. Pour assurer que la contrainte macroscopique reste constante durant le temps de fluage, une étape de réactualisation de la contrainte macroscopique est nécessaire. Cela permet de calculer les nouvelles contraintes des cellules qui serviront au prochain incrément du fluage. Le chargement du fluage est donc modélisé de façon incrémentale et le temps du dwell est divisé en incréments de 1 seconde. Après chaque incrément du temps, l'effet du voisinage sur chaque cellule est simulé par une approche proposée par Kröner (voir la section 4.1.2.1).

Le deuxième aspect consiste à prendre en compte le fait que les contraintes des cellules changent au cours du fluage. Une astuce mathématique appelée « temps fictif » est utilisée en considérant que la déformation s'accumule au cours du temps. Le temps fictif permet de repérer l'état de déformation d'une cellule par rapport au changement de contrainte lors du fluage. Les sections suivantes présentent les détails de ces deux aspects.

Finalement, la déformation du fluage cumulée pour chaque cellule à la fin du fluage s'obtient par :

$$\varepsilon_f^C = \sum_{i=1}^{N^{inc}} \Delta \varepsilon_f \quad (4.6)$$



#### 4.1.2.1 Interaction entre une cellule et son voisinage lors du fluage par l'hypothèse de Kröner

Un aspect important de cette étude est de comprendre quel est le rôle du voisinage dans la déformation d'un grain et comment un grain déformé dans une microstructure réelle affecte ses voisins. L'effet du voisinage et l'interaction d'un grain avec son voisinage dans une microstructure sont des sujets très compliqués qui ne sont pas complètement maîtrisés. Les travaux expérimentaux présentés dans le premier chapitre montrent quelques aspects connus de ces sujets. En particulier, ils confirment qu'un grain défavorablement orienté pour la déformation expérimente une contrainte élevée. De façon inverse, la contrainte diminue dans un grain mou (favorablement orienté pour la déformation) qui peut considérablement se déformer plastiquement surtout si la contrainte est maintenue. D'autre part, un grain avec une orientation cristallographique donnée se comporte différemment dans des voisinages différents.

L'interaction entre un grain et son voisinage lors du fluage est modélisée par une approche proposée par Kröner (Mura, 1987). D'après cette théorie, l'interaction entre un grain et son voisinage introduit une déformation, appelée « déformation de Kröner »,  $\varepsilon^K$ , dans le grain. Cette déformation est caractérisée par la moyenne de déformation plastique du voisinage (6 cellules voisines dans cette étude) et la déformation plastique du grain et s'écrit comme :

$$\varepsilon^K = \left( \frac{1}{6} \sum_1^6 \varepsilon_f^{CV} \right) - \varepsilon_f^{CC} \quad (4.7)$$

où  $\varepsilon_f^{CC}$  et  $\varepsilon_f^{CV}$  représentent la déformation du fluage d'une cellule centrale et celles de ses cellules voisines, respectivement. À la fin de chaque incrément de temps de fluage  $\Delta t$ , la déformation de Kröner  $\varepsilon^K$  sera ajoutée à la déformation de chaque cellule afin d'intégrer l'effet du voisinage. La déformation des cellules sera alors réactualisée telle que :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{t+\Delta t} = \boldsymbol{\varepsilon}^t + \boldsymbol{\varepsilon}^K \quad (4.8)$$

En effet, quand le voisinage se déforme plastiquement plus que le grain lui-même, il transfère sa déformation sur le grain. Cela cause une baisse de contrainte dans le voisinage et introduit une contrainte élevée dans le grain. Il en résulte une déformation de Kröner positive. À l'inverse, quand un grain se déforme plastiquement plus que son voisinage, il transfère sa déformation sur son voisinage. Cela diminue la contrainte dans le grain et introduit une contrainte élevée dans le voisinage. Dans cette étude, la théorie de Kröner permet de reproduire cet effet par une déformation de Kröner négative.

L'évolution de la déformation dans une cellule affecte élastiquement la contrainte locale et la nouvelle contrainte dans la cellule peut être calculée grâce à :

$$\boldsymbol{\sigma}^{t+\Delta t} = \boldsymbol{\sigma}^t + (E^C \boldsymbol{\varepsilon}^K) \quad (4.9)$$

En intégrant l'effet du voisinage par l'approche de Kröner, les contraintes et les déformations des cellules changent progressivement. Ce changement à l'échelle locale peut introduire de la déformation plastique dans les cellules. À l'échelle macroscopique, cela affecte la moyenne de contraintes des cellules. Pour prendre en compte ces aspects, une fois la contrainte d'une cellule calculée, le modèle AC vérifie la nouvelle contrainte de la cellule dépasse le seuil critique de la plasticité pour cette cellule et, si nécessaire, la déformation plastique résultante dans les cellules sera de nouveau calculée. En conséquence, leurs contraintes critiques seront adaptées et mises à jour. À l'échelle macroscopique, le modèle AC vérifie que la moyenne des contraintes de toutes les cellules est égale à la consigne. Si cette condition n'est pas satisfaite, un incrément de déformation macroscopique, reproduisant aussi le phénomène de fluage est imposé sur la microstructure. L'incrément de la déformation macroscopique est localisé dans toutes les cellules par la règle de transition d'échelle (Éq. (3.23)). Cela introduit dans chaque cellule une déformation appelée « déformation de réactualisation »  $\boldsymbol{\varepsilon}_a^C$ . La déformation de réactualisation est ajoutée à la déformation des cellules pour obtenir la nouvelle déformation d'une cellule comme :

$$\varepsilon^C = \varepsilon^C + \varepsilon_a^C \quad (4.10)$$

#### 4.1.2.2 Prise en compte du changement de contrainte locale par un temps fictif

Lors d'un essai de fluage réel, l'ensemble des phénomènes physiques affectant les microstructures cause un changement au niveau des contraintes et des déformations des grains. La contrainte d'un grain à l'instant  $t$  n'est pas la même qu'à l'instant  $t + \Delta t$ . Par conséquent, ce grain ne suit pas le même comportement de fluage à l'instant  $t + \Delta t$  et aura un différent régime de déformation. Pour modéliser cet effet, un paramètre appelé « temps fictif »  $t_{fic}$  est introduit dans le modèle. Ce temps fictif permet de « reprendre » la déformation d'une cellule induite par le fluage jusqu'à  $t + \Delta t$  par rapport à la nouvelle contrainte à l'instant  $t + \Delta t$ . Le temps fictif est une astuce mathématique afin d'adapter le changement du comportement mécanique des grains lors du fluage mais il décrit bien également ce qui se passe au niveau du grain par la conservation de la déformation du grain. Le schéma de calcul du temps fictif est présenté dans la Figure 4-1. Pour, une cellule ayant une déformation  $\varepsilon_f^t$  et une contrainte  $\sigma^t$  à l'instant  $t$ , la contrainte de cette cellule change à l'instant  $t + \Delta t$  à cause des micromécanismes microstructuraux décrits plus haute. La contrainte de la cellule devient alors  $\sigma^{t+\Delta t}$ . Pour calculer la déformation du fluage de cette cellule à l'instant  $t + \Delta t$ , il faut d'abord trouver le statut actuel de cette cellule par rapport la contrainte  $\sigma^{t+\Delta t}$ . Autrement dit, il faut savoir que pour ce niveau de contrainte, à quel instant la cellule aura une déformation égale à  $\varepsilon_f^t$ . Cet intervalle de temps est appelé le temps fictif. Il doit être considéré comme le temps initial dans le calcul de la déformation de la cellule à l'instant  $t + \Delta t$  et la charge  $\sigma^{t+\Delta t}$ .

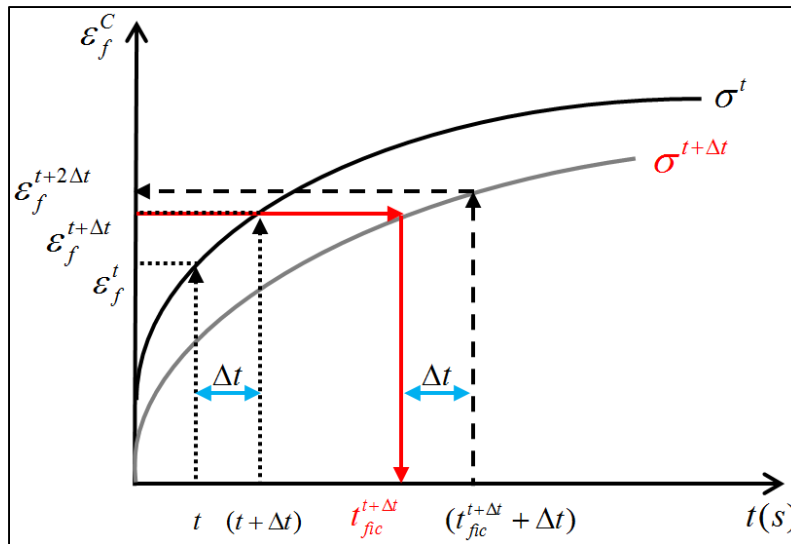


Figure 4-1 Actualisation de la déformation du fluage d'une cellule en fonction de sa nouvelle contrainte par le temps fictif

Le temps fictif est une quantité positive et s'obtient pour chaque cellule à chaque incrément du temps à partir de l'approche utilisée pour la modélisation du fluage. Une cellule avec un temps fictif trop élevée ( $>10^5s$ ) est considérée comme une cellule qui arrête de se déformer car un incrément de temps faible ne fait pas varier la valeur de la déformation du fluage.

#### 4.1.3 Décharge

La dernière étape d'un cycle de dwell-fatigue est l'étape de décharge. La modélisation de cette étape est similaire à l'étape de la charge avec deux différences majeures. Ces différences peuvent être formulées par deux hypothèses. Premièrement, la plasticité est négligée: la décharge est supposée être complètement élastique et il n'y a pas d'interactions plastiques entre les cellules durant cette étape. Deuxièmement, à la fin de la décharge, la contrainte macroscopique devient nulle. Pour modéliser la décharge, dans cette étude, on assure qu'à la fin de la décharge, la moyenne des contraintes des cellules soit nulle (Éq. (3.34)). Pour atteindre cette condition, des incréments de déformation macroscopique sont imposés à la microstructure pour avoir une contrainte macroscopique nulle. Comme la décharge est élastique, un coefficient d'ajustement est notamment utilisé pour que la

moyenne des contraintes de toutes les cellules converge vers zéro.

La fin de la décharge est considérée comme la fin d'un cycle. À cette étape, malgré que la charge macroscopique soit nulle, les contraintes et les déformations locales ne sont pas nulles et chaque cellule, selon son orientation cristallographique, se trouve en tension ou en compression. Les contraintes et les déformations résiduelles des cellules sont conservées à la fin d'un cycle et elles constituent les états initiaux des cellules au début du prochain cycle.

#### **4.2 Modélisation du comportement viscoplastique cristallin lors du temps de maintien par deux approches**

Cette partie du modèle AC vise à modéliser l'étape du maintien à charge maximale en dwell-fatigue. Cette étape peut être modélisée par un chargement du fluage. Deux approches sont utilisées dans cette étude pour modéliser le fluage. La première approche est basée sur une équation de type Hollomon. Cette équation est une fonction puissance du temps de fluage, de la contrainte des cellules et d'un paramètre constant du matériau. La deuxième approche consiste également en une équation de puissance mais basée sur le comportement cristallin. Ces deux approches sont détaillées par la suite.

Pour que le comportement mécanique modélisé soit plus réaliste, l'anisotropie des cellules est intégrée dans la simulation du fluage et chaque cellule flue dépendant à son orientation cristallographique. Comme précisé précédemment, le fluage est modélisé par des incréments du temps  $\Delta t = 1s$  où les interactions entre des cellules et leurs voisinages sont prises en compte par l'hypothèse de Kröner.

##### **4.2.1 Approche 1 : loi de fluage macroscopique basée sur l'équation du fluage de Hollomon**

La loi du fluage proposée par Hollomon est intéressante pour décrire le comportement macroscopique d'un alliage de titane lors du fluage secondaire. Cependant, cette loi prévoit une vitesse de déformation infinie au moment  $t_0=0$  et n'est pas à priori bien adaptée pour

modéliser le fluage primaire. Étant donné que l'étape du fluage en dwell-fatigue est de type fluage primaire, une version modifiée de cette équation est proposée ici. Cette nouvelle équation vise à prendre en compte des aspects du comportement mécanique que ne sont pas considérés dans l'équation de Hollomon initiale. Un paramètre du temps appelé « temps constant »  $t_{cons}$  est considéré dans l'équation (4.11) pour diminuer la vitesse de déformation du fluage au départ et reproduire un comportement mécanique de type fluage primaire. L'incrément de la déformation du fluage des cellules à chaque incrément du temps  $\varepsilon_f^C$  se calcule comme :

$$\varepsilon_f^C = \left( \frac{\sigma^C}{K^C} \right)^a (t + t_{cons})^b - \left( \frac{\sigma^C}{K^C} \right)^a (t_{cons})^b \quad (4.11)$$

où  $K^C$  est une constante du matériau qui permet de prendre en compte l'anisotropie du matériau. La valeur de  $K^C$  change pour chaque cellule et il dépend de son orientation cristallographique. Les paramètres  $a$  et  $b$  sont des paramètres du matériau pour décrire respectivement l'effet de la contrainte et du temps sur la déformation du fluage. La façon dont les paramètres  $K^C$ ,  $a$  et  $b$  et  $t_{cons}$  sont estimés dans cette étude est discuté à la fin de cette section.

Dans le cas présent, le temps fictif se calcule comme :

$$t_{fic}^{t+\Delta t} = \left[ \frac{\varepsilon_f^t}{\left[ \frac{\sigma^{t+\Delta t}}{K^C} \right]^a} \right]^{1/b} \quad (4.12)$$

#### 4.2.1.1 Intégration de l'anisotropie lors du fluage : évolution linéaire du paramètre K en fonction de facteur de Schmid

Dans cette équation, l'anisotropie durant le fluage est intégrée par un paramètre du matériau appelé  $K^C$ . Une dépendance linéaire entre ce paramètre et le facteur de Schmid maximal (basal ou prismatique) de chaque cellule est envisagée dans cette étude. La Figure 4-2 montre l'évolution linéaire de  $K^C$  en fonction des facteurs de Schmid des cellules. Cela conduit à une relation inverse entre  $K^C$  et la déformation du fluage. Un facteur  $K^C$  élevé entraîne un très faible fluage. En l'absence des données expérimentales précises dans la littérature, les valeurs minimum et maximum ( $K_{\text{Min}}$ ,  $K_{\text{Max}}$ ) de ce paramètre sont ajustées afin qu'il soit proches des quelques observations expérimentales disponibles (voir le Tableau 4.1).

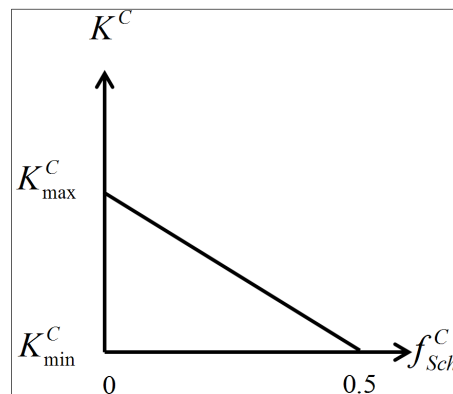


Figure 4-2 Constante  $K^C$  en fonction du facteur de Schmid

La constante du matériau  $K^C$  est calculée en fonction du facteur de Schmid  $f_{Sch}^C$  par l'équation suivante:

$$K^C = K_{\text{max}}^C - 2(K_{\text{max}}^C - K_{\text{min}}^C)f_{Sch}^C \quad (4.13)$$

On voit que pour une cellule avec un facteur de Schmid nul, la valeur de  $K^C$  est maximale et il est minimum pour une cellule favorablement orientée avec un facteur de Schmid maximal

égal à 0.5. Le Tableau 4.1 montre les valeurs maximum et minimum de  $K^C$  utilisées pour cette étude.

Tableau 4.1 Valeurs maximum et minimum de  $K^C$

Paramètre	$K_{\min}^C$	$K_{\max}^C$
$K^C$ (MPa)	1500	5500

Il faut noter que vu les faibles déformations mises en jeu, les valeurs de  $K^C$  des cellules restent constantes durant le chargement dwell-fatigue.

#### 4.2.1.2 Paramètres $a$ , $b$ et $t_{cons}$

Dans cette étude, ces paramètres ont été ajustés en comparant les courbes macroscopiques du fluage obtenues du modèle AC avec les courbes expérimentales du travail de Brandes (Brandes, 2008). Brandes obtient des courbes du fluage pour un alliage de titane Ti-6-4 ayant des grains de petite taille sous trois niveaux de contrainte. Les valeurs optimales des paramètres  $a$  et  $b$  et  $t_{cons}$ , sont obtenus par le modèle AC.

Comme mentionné précédemment, l'équation de Hollomon prévoit un taux de déformation très élevé à l'instant  $t=0$ . Cela conduit à des fortes déformations du fluage dès le départ. C'est pourquoi, l'équation de Hollomon a été modifiée pour reproduire un comportement du fluage primaire. Un paramètre du temps appelé «  $t_{cons}$  » est introduit dans l'équation (4.11) afin de diminuer le taux de déformation du fluage au temps  $t=0s$  en décalant artificiellement la courbe du fluage. La Figure 4-3 présente l'effet du  $t_{cons}$  sur la courbe de fluage.



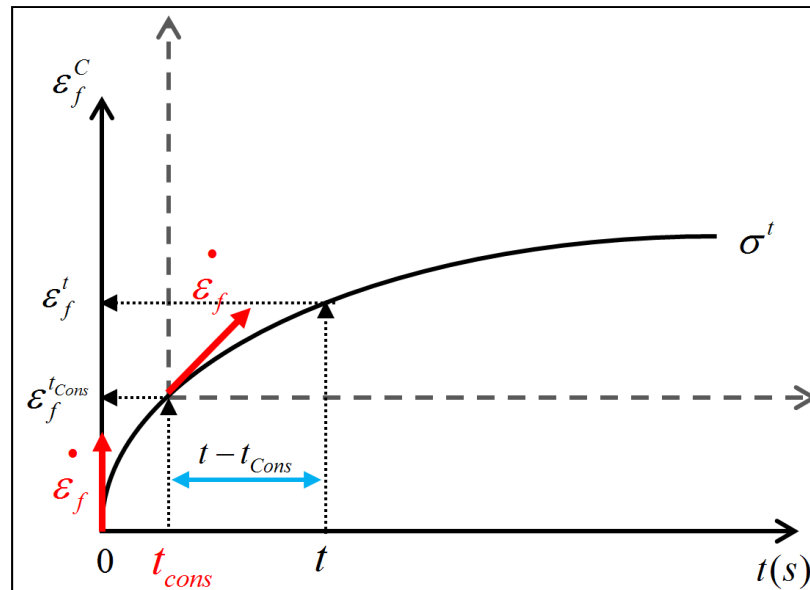


Figure 4-3 Réduction de la vitesse du fluage à l'instant  $t=0s$  par un paramètre de  $t_{cons}$

Comme on voit dans l'équation (4.11), le temps constant  $t_{cons}$  est ajouté au temps  $t$  décrivant le phénomène de fluage. En appliquant cette démarche, on obtient un taux de déformation en fluage initial non infini. Un temps constant de 50s indépendant du niveau de contrainte est choisi dans cette étude et présenté dans le Tableau 4.2. En utilisant ces données on peut, par exemple, comparer la vitesse de déformation sans et avec le temps constant pour une cellule ayant un facteur de Schmid maximal et une contrainte de 855MPa. On obtient des vitesses de déformation égale à  $0,0013 s^{-1}$  et  $4,28 \cdot 10^{-5} s^{-1}$  pour des comportements en fluage sans et avec le temps constant, respectivement. On remarque comment le temps constant diminue la vitesse de déformation initiale en fluage et permet aux cellules à rester dans un domaine du fluage primaire.

Les paramètres  $a$  et  $b$  sont des paramètres sans dimension. La Figure 4-4 montre la comparaison entre les courbes expérimentales de Brandes et celles obtenues par le modèle AC en fluage pur. On voit que les courbes de modélisation sont décalées de celles d'expérimentales. Il semble que les paramètres  $a$  et  $b$  constant ne peuvent pas décrire le comportement du matériau. Les valeurs qui donnent l'estimation la plus proche aux courbes

expérimentales sont acceptées comme les quantités fixes de ces trois paramètres. Pour trouver ces valeurs, d'abord, leurs quantités initiales ont été obtenues par un processus d'optimisation en utilisant l'équation du fluage. Ensuite, ces valeurs initiales ont été utilisées et ajustées dans un AC non texturée pour différents niveaux de chargement en fluage pur afin d'obtenir les valeurs qui donnent des courbes proches aux courbes expérimentales. Le Tableau 4.2 montre les valeurs fixes de  $a$  et  $b$  et  $t_{cons}$ .

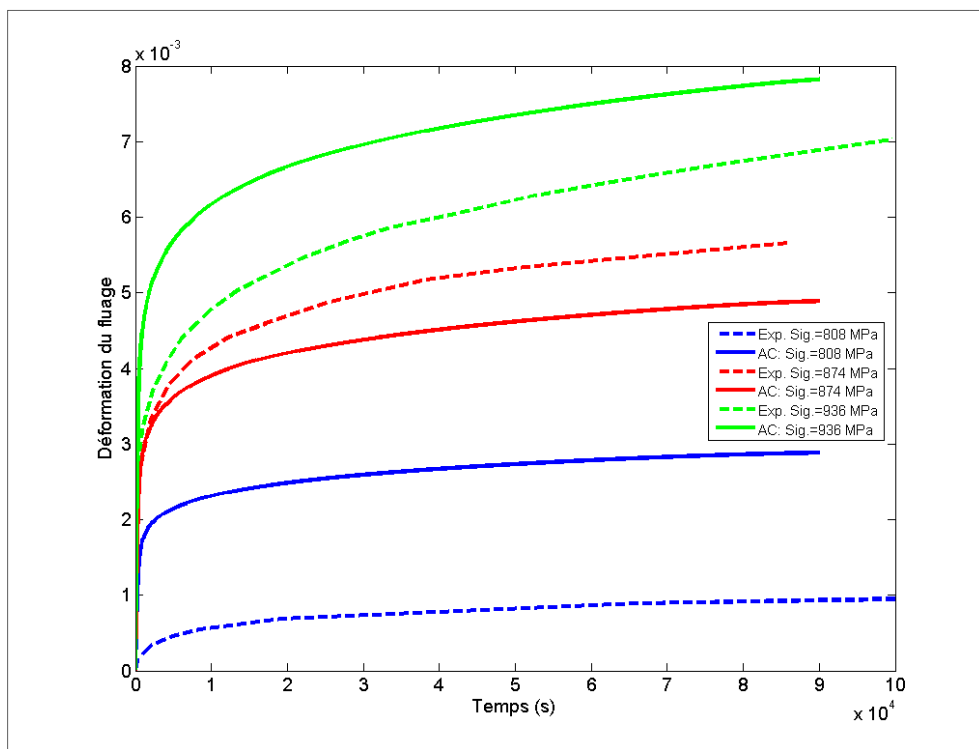


Figure 4-4 Comparaison des courbes expérimentales de Brandes (Brandes, 2008) avec celles obtenues par le modèle AC avec des paramètres  $a$ ,  $b$  et  $t_{cons}$  fixes

Tableau 4.2 Paramètre  $a$ ,  $b$  et  $t_{cons}$  fixés dans cette étude pour l'approche 1

Paramètre	$a$	$b$	$t_{cons}$ (s)
Valeur	8	0,12	50

#### 4.2.2 Approche 2 : loi de fluage microscopique en cisaillement plastique

Pour mieux modéliser le fluage à l'échelle locale, il faut que le comportement des cellules corresponde à leurs propriétés cristallines. Pour cela, une approche basée sur la plasticité cristalline est utilisée dans cette étude pour relier le comportement des cellules à leur contrainte de cisaillement et leur système de glissement. La déformation du fluage des cellules  $\varepsilon_f^C$  en plasticité cristalline s'écrit comme :

$$\varepsilon_f^C = \gamma_s f_{Sch}^C \quad (4.14)$$

où  $\gamma_s$  est le taux de glissement cristallin et peut s'obtenir par l'équation suivante. (Cette équation est une adaptation des lois du comportement en fluage utilisées par plusieurs auteurs (Hutchinson, 1976; Roters *et al.*, 2010)).

$$\tau_s^C = \kappa (\dot{\gamma}_s)^m (\gamma_s)^n \quad (4.15)$$

Dans cette équation  $m$  est un exposant lié à la sensibilité au taux de cisaillement,  $n$  est l'exposant d'écroutissage et  $\kappa$  est une constante du matériau.  $\tau_s^C$  est la cission de la cellule sur le système de glissement  $s$ . Puisque dans cette étude un seul système de glissement est considéré pour chaque cellule, l'indice  $s$  n'est pas nécessaire et sera retiré par la suite. Pour calculer le taux de cisaillement  $\dot{\gamma}$ , l'équation (4.15) peut être écrite comme :

$$\dot{\gamma} = \left( \frac{\tau^C}{\kappa} \right)^{\frac{1}{m}} \gamma^{\frac{-n}{m}} \quad (4.16)$$

En remplaçant  $\dot{\gamma}$  par  $\frac{d\gamma}{dt}$  dans l'équation (4.16) et en calculant l'intégrale des deux côtés de l'équation, on obtient le glissement comme :

$$\gamma = \left[ \left( \frac{m+n}{m} \right)^{\frac{m}{m+n}} \right] \left( \frac{\tau^C}{\kappa} \right)^{\frac{1}{m+n}} t^{\frac{m}{m+n}} \quad (4.17)$$

On remplaçant l'équation (4.17) dans l'équation (4.14), la déformation du fluage de chaque cellule s'obtient comme :

$$\varepsilon_f^C = \left[ \left( \frac{m+n}{m} \right)^{\frac{m}{m+n}} \right] f_{Sch}^C \left( \frac{\tau^C}{\kappa} \right)^{\frac{1}{m+n}} t^{\frac{m}{m+n}} \quad (4.18)$$

#### 4.2.2.1 Intégration de l'hétérogénéité lors du fluage : paramètre L dépendant au facteur de Schmid

Au contraire de la première approche où on intègre l'hétérogénéité cristalline par une relation linéaire entre une constante du matériau et les facteurs de Schmid des cellules, dans cette approche l'anisotropie est directement intégrée au travers du facteur de Schmid. On peut, par la suite, simplifier l'équation (4.18) en regroupant les constantes du matériau, les facteurs dépendant de l'orientation et les variables du temps. On écrit :

$$\varepsilon_f^C = \left[ \left( \frac{m+n}{m} \right)^{\frac{m}{m+n}} \right] \left[ \left( \frac{f_{Sch}^C}{\kappa} \right)^{\frac{1}{m+n}} f_{Sch}^C \right] (\sigma^C)^{\frac{1}{m+n}} t^{\frac{m}{m+n}} \quad (4.19)$$

En introduisant un paramètre appelé  $L$  qui décrit l'effet d'orientation du grain considéré en prenant en compte la constante  $\kappa$  et le facteur de Schmid  $f_{Sch}^C$ , on obtient la déformation du fluage des cellules pour chaque incrément du temps comme :

$$\varepsilon_f^C = \left[ \left( \frac{m+n}{m} \right)^{\frac{m}{m+n}} \right] \left( \frac{1}{L^C} \right)^{\frac{1}{m+n}} (\sigma^C)^{\frac{1}{m+n}} t^{\frac{m}{m+n}} \quad (4.20)$$

où  $L^C$  se calcule pour chaque cellule par l'équation suivante :

$$L^C = \frac{\kappa}{f_{Sch}^{C^{1+m+n}}} \quad (4.21)$$

La Figure 4-5 montre la distribution de  $L^C$  pour 900 cellules d'une microstructure en fonction de leurs facteurs de Schmid (les valeurs de  $m$ ,  $n$  et  $\kappa$  sont présentées dans le Tableau 4.3). On note que pour un facteur de Schmid nul, la valeur de  $L^C$  devient infinie ce qui empêche les cellules ayant leur plan basal perpendiculaire à la direction de chargement de se déformer.

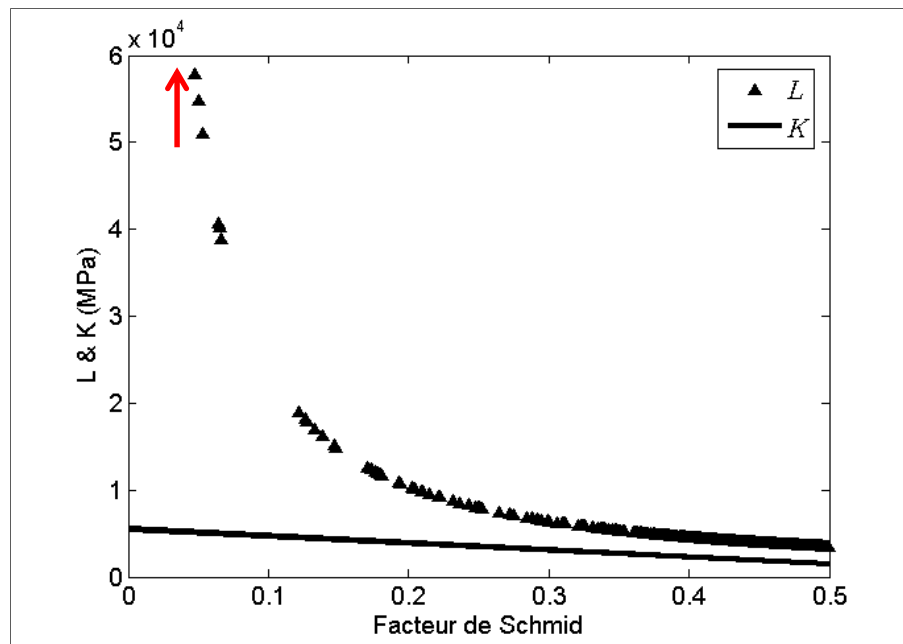


Figure 4-5 Comparaison de la distribution de  $L^C$  et  $K$  en fonction des facteurs de Schmid pour 900 cellules tirées aléatoirement dans l'espace des orientations

Le temps fictif à l'instant  $t + \Delta t$  se calcule aussi à partir de l'équation (4.20) comme :

$$t_{fic}^{t+\Delta t} = \left( \frac{\epsilon_f^t}{\left( \frac{\sigma^{t+\Delta t}}{L^C} \right)^{\frac{1}{m+n}} \left( \frac{m+n}{m} \right)^{\frac{m}{m+n}}} \right)^{\frac{m+n}{m}} \quad (4.22)$$

#### 4.2.2.2 Paramètres $\kappa$ , $m$ et $n$

Dans ses travaux expérimentaux, Neeraj (Neeraj, 2000) a décrit le fluage par une équation de type Hollomon et il a calculé la constante du matériau  $K$ . Dans ses données expérimentales, la variation des constantes du matériau est très marquée. Pour des alliages de titane, il a obtenu une valeur moyenne de 1430 MPa pour la constante du matériau. Dans cette étude, une valeur proche de celle obtenue par Neeraj est choisie comme la constante  $\kappa$  du matériau (voir le Tableau 4.3).

Comme pour la première approche les paramètres  $m$  et  $n$  sont obtenus par des comparaisons des courbes de fluage pur d'AC avec des courbes de fluage expérimentales obtenues par Brandes (Brandes, 2008). La Figure 4-6 montre ces comparaisons. On constate que les courbes d'AC sont décalées par rapport à celles obtenues expérimentalement, particulièrement pour le niveau de contrainte faible de 808 MPa. Cependant, les valeurs obtenues pour les trois paramètres  $m$ ,  $n$  et  $\kappa$  sont acceptées, car sont des valeurs optimales. Le même processus d'optimisation expliqué dans la section 4.2.1.2 a été utilisé également pour obtenir ces valeurs qui sont présentées dans le Tableau 4.3.

En utilisant ces données, on obtient une vitesse de déformation égale à  $2.73 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$  à l'instant  $t=1\text{s}$  pour une cellule ayant un facteur de Schmid maximal et une contrainte égale à 855MPa. Cette vitesse de déformation est inférieure de celle obtenue pour l'instant  $t=1\text{s}$  par l'approche 1, mais elle est supérieure de celle obtenue par la même approche pour le temps constat de 50s.

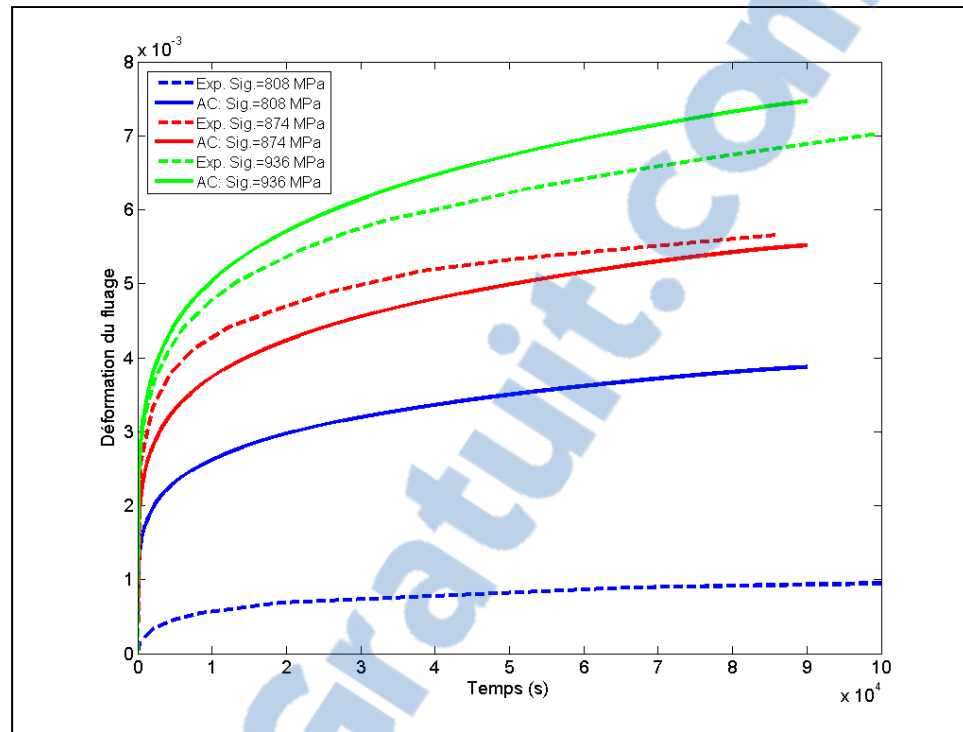


Figure 4-6 Comparaison des courbes expérimentales avec celles obtenues par AC avec des paramètres  $\kappa$ ,  $m$  et  $n$

Tableau 4.3 Paramètre  $m$ ,  $n$  et  $\kappa$  fixés dans cette étude pour l'approche 2

Paramètre	$m$	$n$	$\kappa$ (MPa)
Valeur	0,04	0,162	1500

#### 4.2.3 Comparaison du comportement macroscopique en fluage et fatigue-fluage modélisé par les deux approches

Les courbes macroscopiques en fluage et en dwell-fatigue obtenues par les deux approches sont comparées dans cette section afin de choisir l'approche la plus réaliste. Pour cela, des essais en fluage pur et en dwell-fatigue ont été effectués pour 3000 cycles et sous un niveau de contrainte égale à 855 MPa (90% de la limite d'élasticité du TA6V). Un temps de dwell égale à 30s est choisi. D'abord, les déformations plastiques du fluage et de dwell-fatigue obtenues par les deux approches sont comparées sur la même échelle du temps dans la Figure 4-7. On note que l'approche 2 donne un niveau de déformation plus élevé par rapport la

première approche. Les deux approches prévoient une déformation du fluage proche à la déformation de dwell-fatigue. Cependant, des résultats expérimentaux montrent une différence plus grande entre les deux courbes. En effet, la déformation inélastique de dwell-fatigue  $\varepsilon_D^C$  ne diffère de la courbe de fluage que par l'ajout de déformation plastique due à la charge (fatigue). Elle se calcule comme :

$$\varepsilon_D^C = \varepsilon_p^C + \varepsilon_f^C \quad (4.23)$$

Puisque la déformation de la fatigue se sature après un certain nombre de cycles, le décalage entre la déformation de dwell-fatigue et celle du fluage reste constant. Le modèle pourrait mieux décrire ce qui se passe dans la réalité en modifiant l'étape de décharge et ajoutant l'adoucissement cyclique isotrope et cinématique. Sur cette figure, on note aussi que la vitesse de déformation au début du chargement est plus élevée pour l'approche 1. Ce comportement est plus visible en échelle log-log sur la Figure 4-8. Quand la vitesse de déformation est élevée, le comportement du matériau atteint plus vite à l'étape de fluage secondaire. Étant donné que le comportement des alliages de titane en dwell-fatigue est du type de fluage primaire, on s'intéresse à une vitesse de déformation faible afin de pouvoir modéliser le fluage primaire. Donc, l'approche 2 est plus satisfaisante de cette condition.



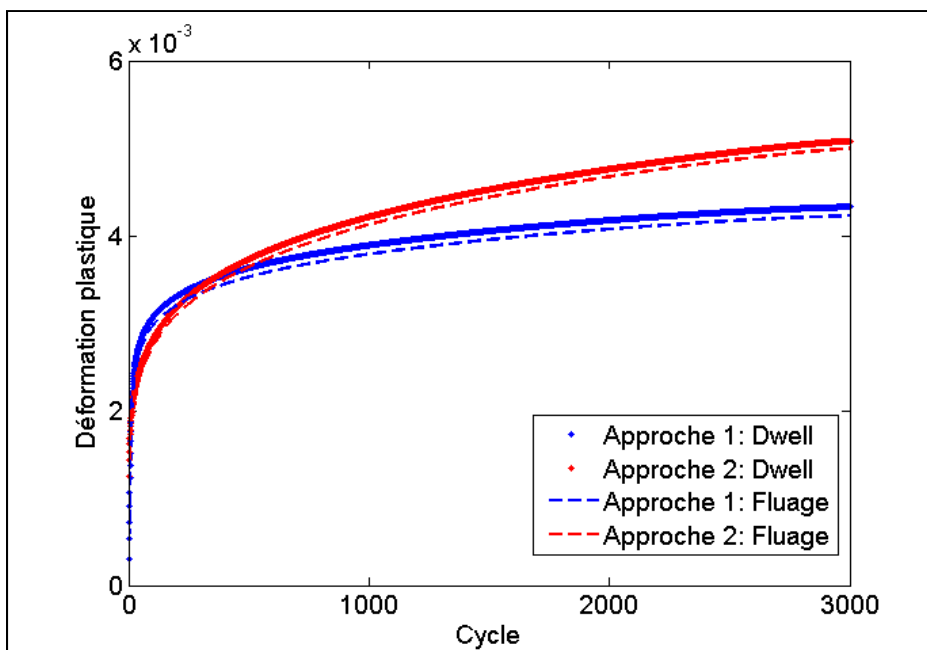


Figure 4-7 Comparaison des déformations macroscopiques du fluage et de dwell-fatigue des approches 1 et 2

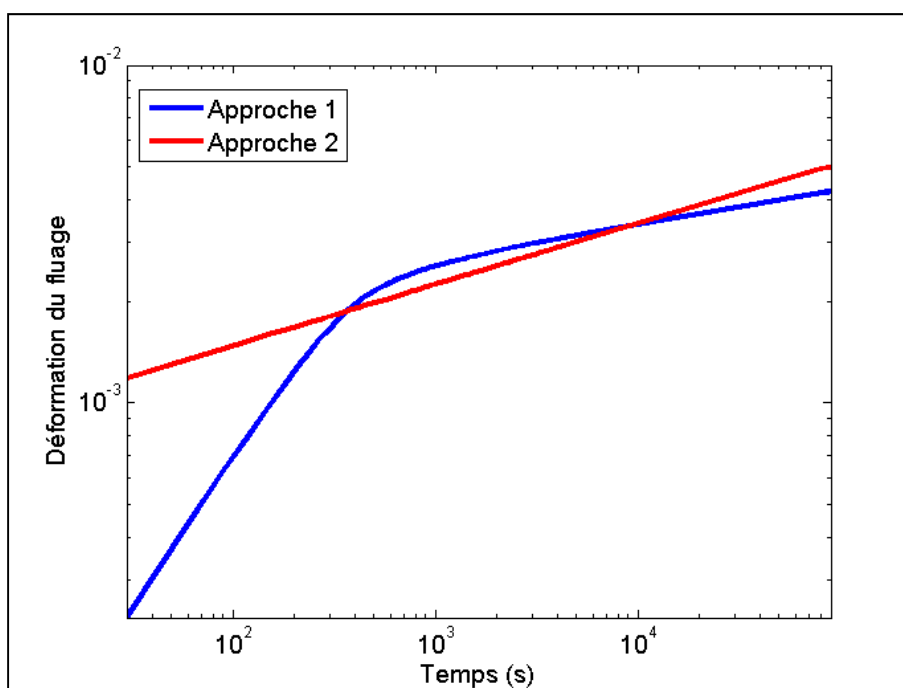


Figure 4-8 Comparaison log-log des déformations inélastiques macroscopiques du fluage et de dwell-fatigue des approches 1 et 2

Pour mieux comprendre le comportement modélisé par ces deux approches et afin de choisir l'approche la plus adaptée, il est intéressant d'extraire les déformations locales. Pour cela, les déformations inélastiques de 900 cellules sont tracées pour les deux approches dans la Figure 4-9 en fonction des angles  $\theta$  (entre la direction de chargement et l'axe [0001]). On remarque que les deux approches donnent des résultats similaires localement. Cependant, les résultats de l'approche 1 montrent des niveaux de déformations non négligeables pour des cellules dures ayant des angles  $\theta$  entre  $0^\circ$  et  $10^\circ$ . Typiquement, ces cellules ont des cissions critiques très élevées sur leurs plans basaux et elles ne se déforment expérimentalement pas au cours de chargement. D'après les résultats obtenus par la première approche, plus la charge macroscopique est élevée plus les déformations de ces cellules sont importantes. L'approche 2, au contraire, ne prévoit aucune déformation pour ces cellules ce qui est plus proche à la réalité. Ces résultats sont principalement guidés par les valeurs de  $K$  et de  $L$  dans les deux approches 1 et 2, respectivement. En effet, la valeur maximale de  $K$  en première approche est égale à 5500MPa pour une cellule ayant un facteur de Schmid égale à 0, tandis que l'approche 2 prévoit une valeur de  $L$  égale à l'infini pour la même cellule (voir la Figure 4-5), ce qui l'empêche à se déformer quel que soit la contrainte. En résumé, en comparant les comportements des deux approches étudiées à l'échelle macroscopique et microscopique, l'approche 2 semble plus adaptée pour modéliser le comportement du fluage à l'échelle macroscopique ainsi qu'à l'échelle locale. À partir de maintenant, l'approche 2 sera utilisée pour le reste de cette étude.

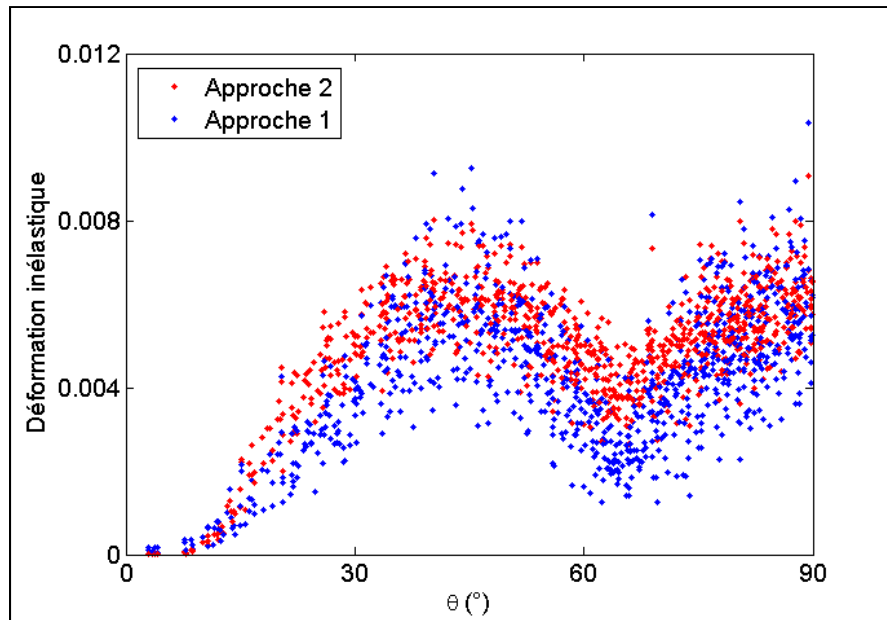


Figure 4-9 Comparaison des déformations inélastiques locales des approches 1 et 2

### 4.3 Exploitation des possibilités du modèle AC pour la modélisation des comportements locaux en fatigue-fluage

Dans cette section de l'étude, des essais en dwell-fatigue sont effectués afin d'explorer les capacités du modèle AC à reproduire les comportements micromécaniques des alliages de titane observés expérimentalement. D'abord, une microstructure non texturée de 900 cellules est soumise à 3000 cycles de dwell-fatigue avec un temps de maintien de 30s sous une contrainte maximale de 855 MPa. L'évolution des déformations inélastiques en fonction des angles  $\theta$  des cellules est étudiée. Les contraintes à la fin de la charge et les contraintes résiduelles sont explorées par la suite. L'effet du temps de maintien sur l'accumulation de la déformation inélastique est présenté ensuite. Finalement, le potentiel du modèle AC à identifier les cellules critiques en ce qui concerne l'amorçage de fissure est discuté. Les orientations cristallographiques de la microstructure étudiée sont distribuées différemment afin d'étudier comment la déformation se localise différemment dans la microstructure. Finalement, une étude statistique sur une microstructure de 10000 cellules est présentée afin de montrer la capacité du modèle AC à modéliser et traiter un grand nombre des cellules.

### 4.3.1 Déformations inélastiques locales

Dans cette section, les déformations inélastiques locales sont étudiées au sein d'un AC en dwell-fatigue. On rappelle que la déformation inélastique est la somme de la déformation plastique de la fatigue et la déformation du fluage. Au cours du chargement, la déformation plastique de la fatigue se sature et la déformation du fluage continue à s'accumuler. Les déformations inélastiques des cellules à la fin d'un cycle sont conservées et constituent les états initiaux des cellules lors du prochain cycle.

La localisation de la déformation dans chaque cellule dépend de son orientation cristallographique et de celle de son voisinage. La Figure 4-10 illustre l'évolution de la localisation de déformation d'une microstructure de 900 cellules pour différents cycles. On note que la déformation est plus importante dans certaines régions de la microstructure. Principalement, ces régions contiennent plus de cellules favorablement orientées pour la déformation (fort facteur de Schmid basal ou prismatique). D'autre part, des régions avec des cellules dures expérimentent moins de déformation. Au cours du chargement cyclique, la déformation s'accumule dans les régions avec des cellules à fort facteur de Schmid. On constate également, comment quelques cellules déformées (Figure 4-10b) peuvent influencer leurs voisins et propager la déformation dans certaines régions de la microstructure.

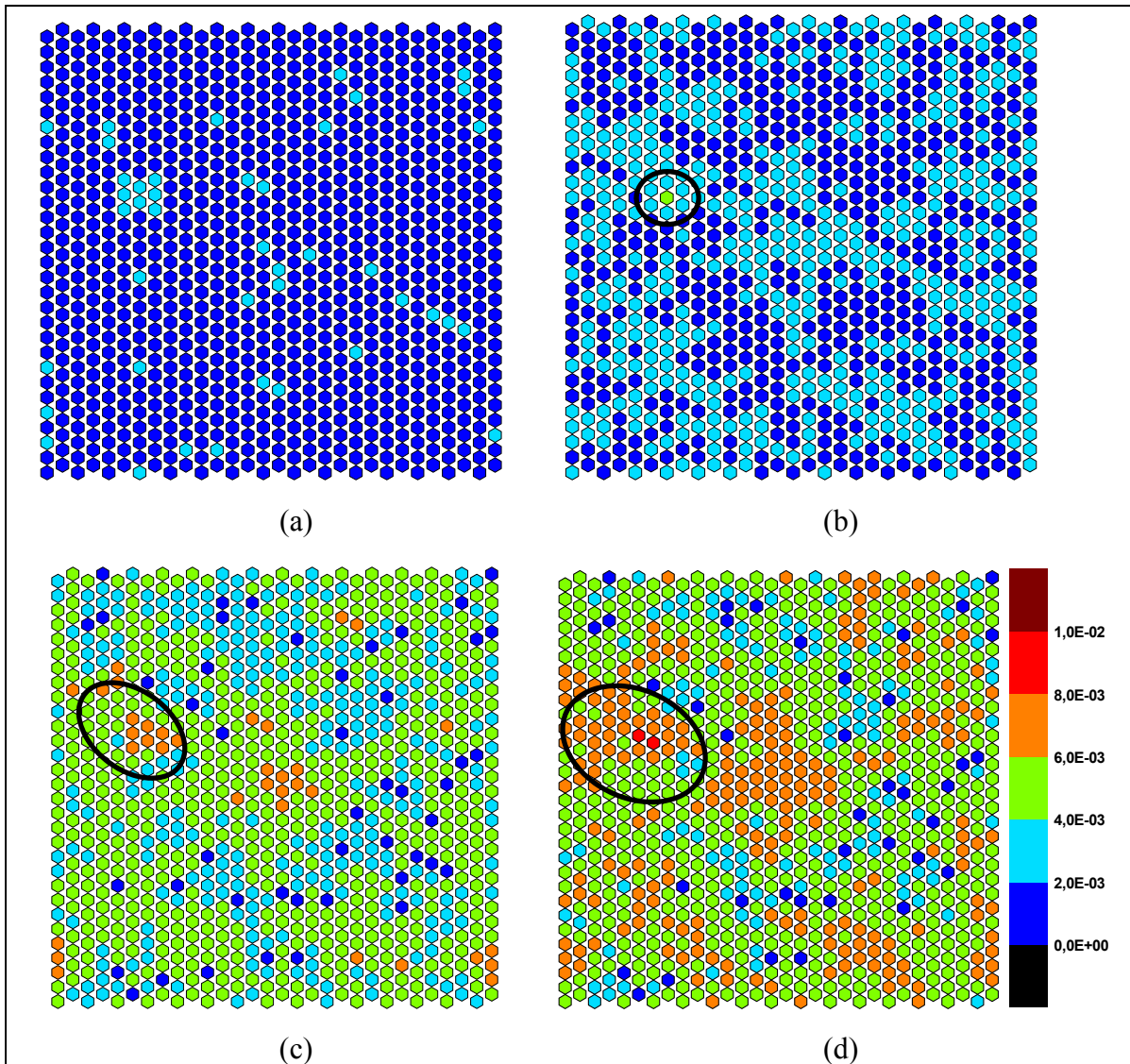


Figure 4-10 Distribution de la déformation inélastique dans une microstructure de 900 cellules après (a) 1, (b) 10, (c) 1000 (d) 3000 cycles

Pour avoir une meilleure idée sur l'orientation des cellules dans les régions déformées et non déformées, l'évolution de la déformation inélastique en fonction de l'angle  $\theta$  est tracée dans la Figure 4-11. On distingue trois zones intéressantes sur cette figure. La première zone consiste en un groupe de cellules dont l'orientation cristallographique ne permet pas qu'elles se déforment ou alors très peu. Ces cellules ont des angles  $\theta$  entre  $0^\circ$  et  $10^\circ$ . La deuxième zone, regroupe les cellules qui se déforment le plus et elles ont généralement des angles  $\theta$  entre  $30^\circ$  et  $60^\circ$  et entre  $70^\circ$  et  $90^\circ$ . La troisième zone contient des cellules avec des angles  $\theta$  entre  $10^\circ$

et 30° (3A) et entre 60° et 70° (3B) qui expérimentent des niveaux déformations intermédiaires. Les cellules dans la zone 3A possèdent des facteurs de Schmid basal et celles dans la zone 3B peuvent avoir des facteurs de Schmid basal et prismatique. Selon le critère d'endommagement pondérant la contrainte normale et la déformation plastique maximale, les cellules de la zone 3A sont susceptibles à l'amorçage de fissure car leur orientation cristallographique leur permet d'avoir une contrainte normale élevée et également un niveau de déformation inélastique important. On remarque aussi la dispersion de la déformation pour un angle  $\theta$  donné révélant aussi le rôle que joue le voisinage dans le comportement de ces orientations.

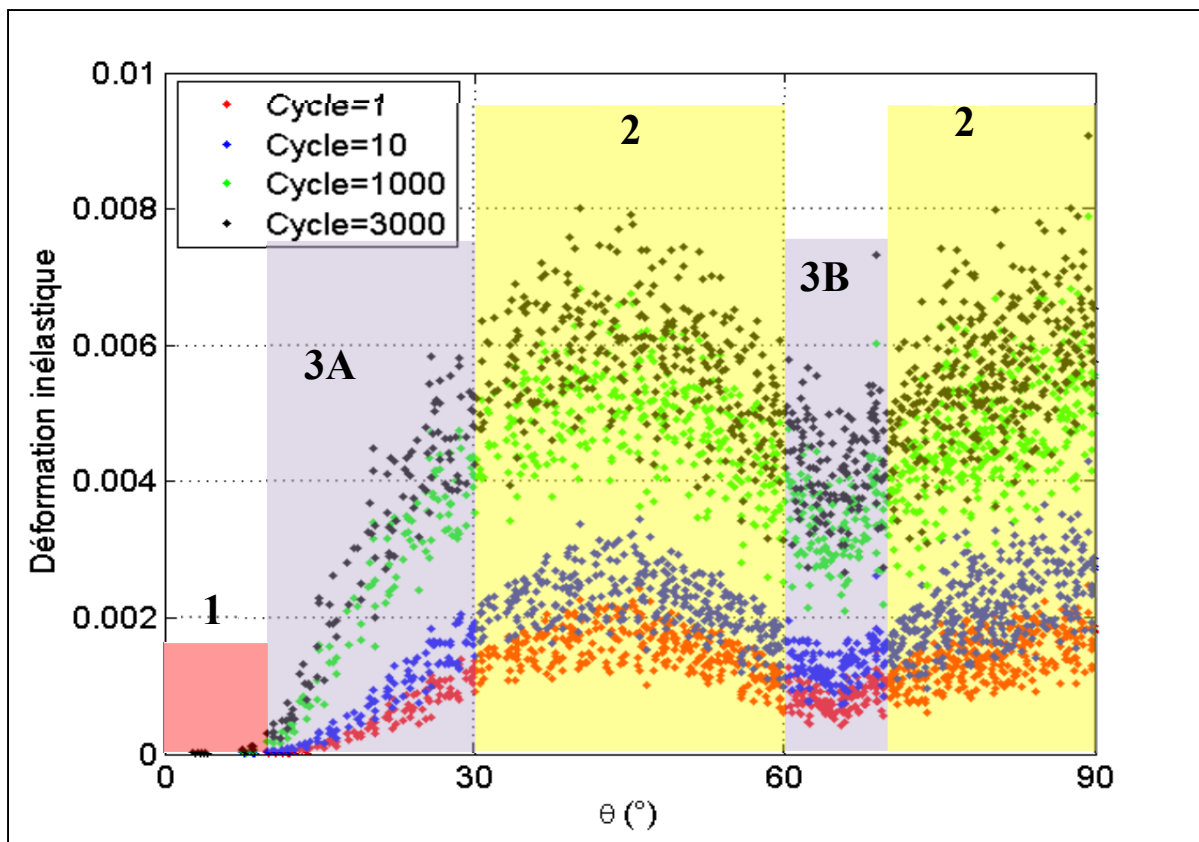


Figure 4-11 Évolution de la déformation inélastique en fonction des angles  $\theta$  pour une microstructure de 900 cellules après 1, 10, 1000 et 3000 cycles de dwell-fatigue

La Figure 4-12 montre la moyenne, le maximum et le minimum de la déformation inélastique en fonction des angles  $\theta$  moyens (sur des intervalles de 10°) pour le 3000<sup>ème</sup> cycle en dwell-

fatigue. On constate que plus les cellules sont favorables pour la déformation plus la dispersion est prononcée, car l'influence du voisinage est plus importante sur la déformation des cellules molles.

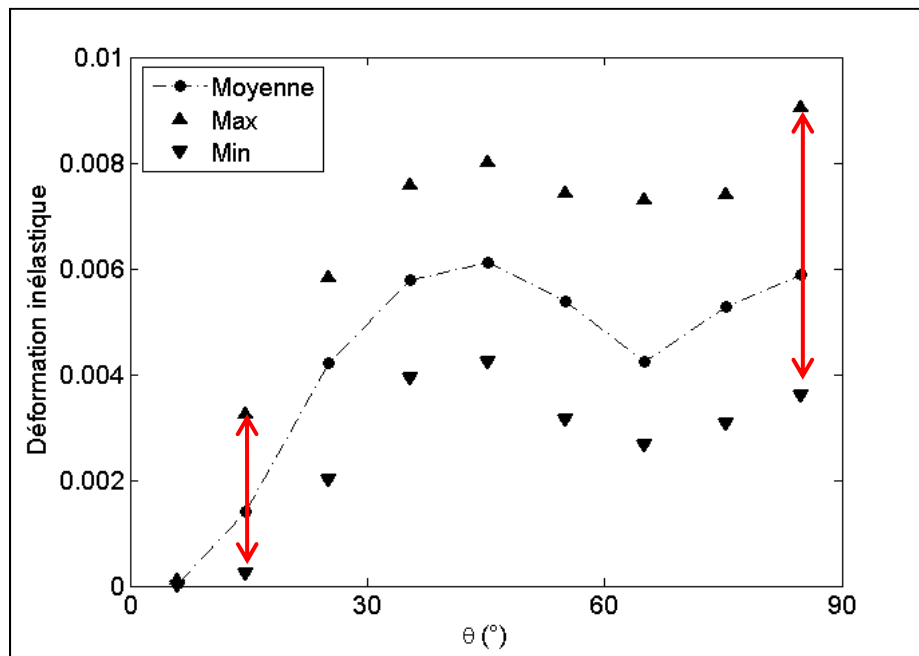


Figure 4-12 Dispersion des déformations inélastiques moyennes en fonction des angles  $\theta$  moyens pour une microstructure de 900 cellules au 3000<sup>ème</sup> cycle de dwell-fatigue

Pour connaître et étudier les orientations et les caractéristiques des cellules déformées par rapport à l'axe du chargement, une idée peut être de projeter ces cellules sur une figure de pôle inverse. La Figure 4-13 illustre les cellules ayant cumulé un niveau de déformation inélastique égale à 0,001 au cours de cyclage, sur des triangles standards associés aux cycles dont elles sont cumulées cette déformation. Quatre cycles sont étudiés : 1, 10, 1000 et 3000. Un nombre plus élevé des cellules atteignent ce niveau de déformation inélastique cumulé au premier cycle par rapport à d'autres cycles. Typiquement, au premier cycle des cellules molles, favorablement orientées pour la déformation, se déforment en premier et elles atteignent rapidement un niveau de 0,001 de déformation inélastique cumulée. Ces cellules se trouvent dans les deux zones des facteurs de Schmid, basal et prismatique. Avec la

continuation du chargement et le transfert de déformation entre des cellules et leurs voisinages, des cellules ayant des facteurs de Schmid intermédiaires commencent à cumuler ce niveau de déformation. On note la présence de ce type des cellules au 10<sup>ème</sup> cycle où les cellules déformées approchent la frontière entre des facteurs de Schmid basal et prismatique. Avec l'augmentation de nombre de cycle, le nombre des cellules qui atteignent ce niveau de déformation cumulée diminue dû à l'écroutissage et des cellules relativement dures commencent à s'accumuler ce niveau de déformation. On remarque cet effet aux 1000<sup>ème</sup> et 3000<sup>ème</sup> cycles. Au dernier cycle seulement quelques cellules ayant orientées pour le glissement basal atteignent 0,001 de déformation inélastique.

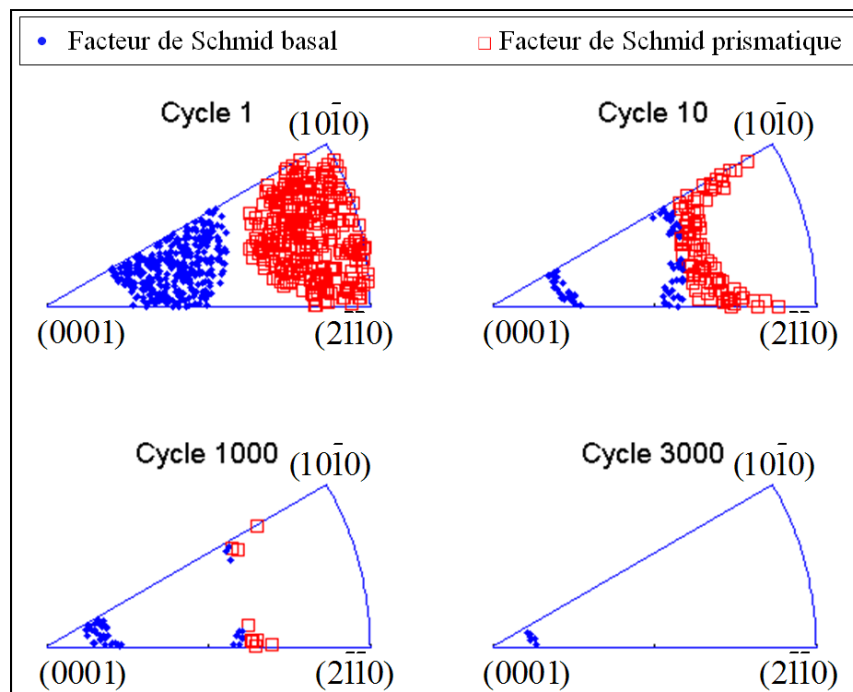


Figure 4-13 Triangles standards de 1, 10, 1000 et 3000<sup>ème</sup> cycle avec la projection des cellules ayant atteint une déformation inélastique cumulée de 0,001 au cours de cyclage

### 4.3.2 Contraintes locales et contraintes résiduelles

La contrainte locale à la fin de la charge est un élément important pour identifier les cellules susceptibles à l'amorçage de fissure. En effet, selon les études expérimentales présentées



dans le premier chapitre, les fissures s'amorcent dans des grains ayant une contrainte normale élevée sur les plans basaux. D'autre part, les contraintes résiduelles jouent des rôles importants sur l'état d'une cellule d'un cycle à l'autre, car ces contraintes varient d'un cycle à l'autre dépendant du voisinage et de l'historique d'une cellule et elles construisent les états initiaux des cellules au début de chaque cycle. Dans cette section sont analysées les contraintes locales des cellules dans une microstructure d'AC.

#### 4.3.2.1 Contraintes locales à la fin de la charge

À la fin de la charge où la moyenne des contraintes de toutes les cellules est égale à la consigne, les contraintes locales peuvent beaucoup varier d'une cellule à l'autre, dépendant de son orientation cristallographique et celles de son voisinage. L'évolution des contraintes locales pour 1, 10, 1000 et 3000 cycles de dwell-fatigue sont tracées en fonction de l'angle  $\theta$  pour la microstructure étudiée à la Figure 4-14. Les trois zones discutées précédemment à la Figure 4-11 peuvent également être distinguées sur cette figure aussi. Les contraintes sont très élevées et très dispersées pour la zone 1 et sont moins élevées pour la zone 2. La troisième zone contient des cellules avec des niveaux de contraintes intermédiaires peu dispersées pour la zone 3B et très dispersées pour certaines régions de la zone 3A. Au cours du chargement, la contrainte locale chute pour les cellules favorablement orientées pour la déformation et elle augmente dans les cellules dures. On remarque qu'après 1000 cycles, la vitesse de l'abaissement de la contrainte diminue fortement dans les cellules molles mais la contrainte continue à augmenter dans les cellules dures. Cela est dû au fait que les cissions critiques des cellules dures sont très élevées et elles déforment très peu même avec le transfert de la déformation de leurs voisins. Les contraintes continuent donc à augmenter dans les cellules dures.

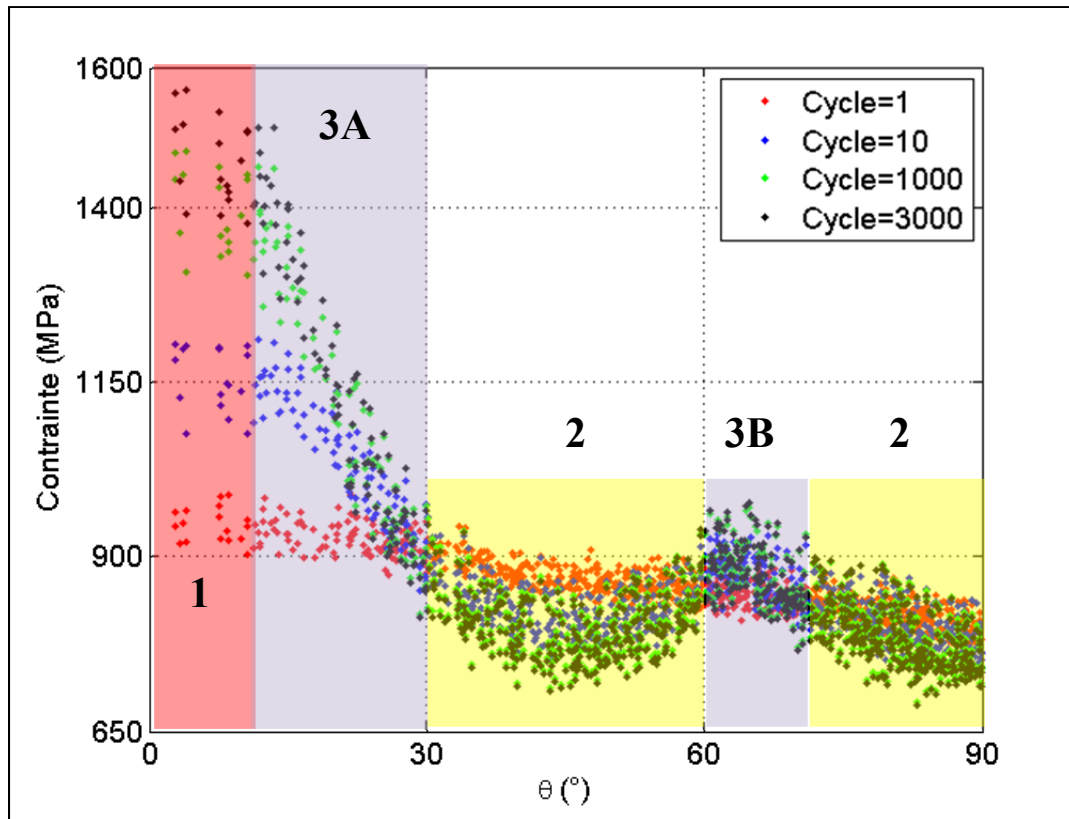


Figure 4-14 Évolution des contraintes locales à la fin de la charge en fonction des angles  $\theta$  pour une microstructure de 900 cellules après 1, 10, 1000 et 3000 cycles de dwell-fatigue

Pour avoir une meilleure idée sur les contraintes locales, la Figure 4-15 montre la distribution des contraintes des cellules en fonction de leur facteur de Schmid. On voit que les cellules avec de faibles facteurs de Schmid possèdent les contraintes les plus élevées et inversement, les cellules avec des facteurs de Schmid élevée ont des niveaux de contraintes faibles.

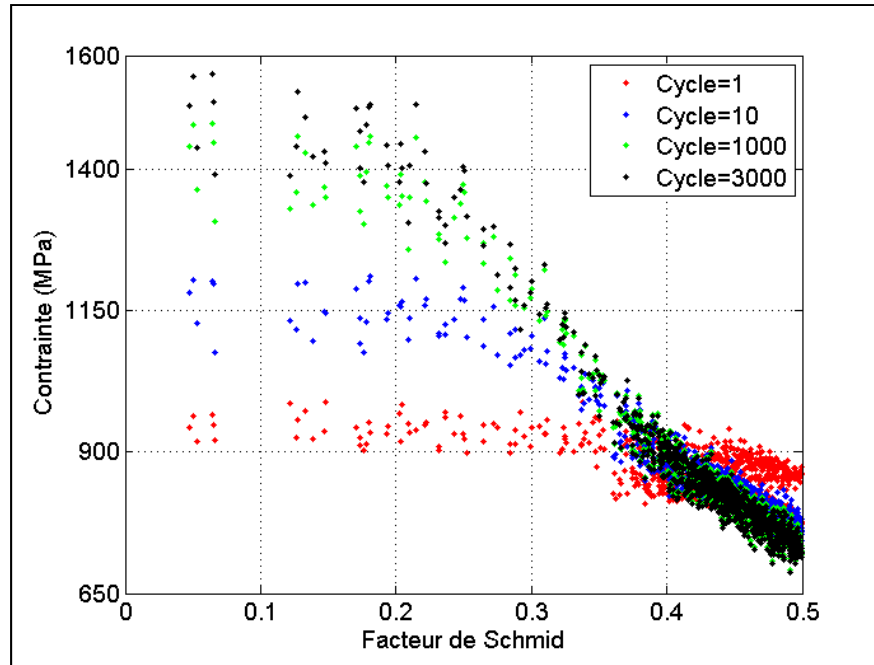


Figure 4-15 Évolution des contraintes locales à la fin de la charge en fonction des facteurs de Schmid pour une microstructure de 900 cellules après 1, 10, 1000 et 3000 cycles de dwell-fatigue

#### 4.3.2.2 Contraintes résiduelles à la fin de la décharge

À la fin de la décharge (lorsque la contrainte macroscopique est nulle), les contraintes locales sont différentes de zéro. Ces contraintes résiduelles restent dans les cellules et elles représentent les états initiaux des cellules au début du prochain cycle. En théorie, les cellules déformées se trouvent en compression et possèdent des contraintes résiduelles négatives. D'autre part, les cellules dures avec moins de déformation expérimentent de la tension et ont des contraintes résiduelles positives. Cependant, cela n'est pas toujours le cas, car certaines cellules avec de fortes déformations plastiques peuvent se trouver en tension et des cellules avec de faibles déformations peuvent expérimenter la compression. En effet, cela dépend fortement de la configuration des cellules voisines et l'historique de la déformation d'une cellule elle-même. Différentes configurations des cellules voisines conduites à des propriétés du voisinage différentes. L'ensemble des propriétés du voisinage, l'orientation cristallographique et l'historique de la déformation d'une cellule influencent son

comportement pour garder l'équilibre dans un AC afin de satisfaire le comportement macroscopique. Cela montre aussi un des avantages du modèle AC en traitant des comportements microstructuraux. La Figure 4-16 montre l'évolution des contraintes résiduelles en fonction des angles  $\theta$  pour cette microstructure. Les cellules dures possèdent des contraintes résiduelles les plus élevées en tension et à l'inverse, les cellules molles se trouvent avec des contraintes résiduelles non négligeables en compression. On remarque que des cellules ayant des angles  $\theta$  autour de  $45^\circ$  expérimentent des niveaux plus importants en compression par rapport celles avec des angles  $\theta$  près à  $90^\circ$ . Cela peut être due au fait que le module d'élasticité dans des cellules avec des angles  $\theta$  proche à  $45^\circ$  est plus élevées par rapport les cellules avec des angles  $\theta$  proche à  $90^\circ$ . Ainsi, cela peut être aussi influencé par le système de glissement basal des cellules avec des angles  $\theta$  proche à  $45^\circ$  et le système de glissement prismatique des cellules avec des angles  $\theta$  près à  $90^\circ$ . On note également sur cette figure, la dispersion des contraintes résiduelles due au voisinage pour un angle  $\theta$  donné.

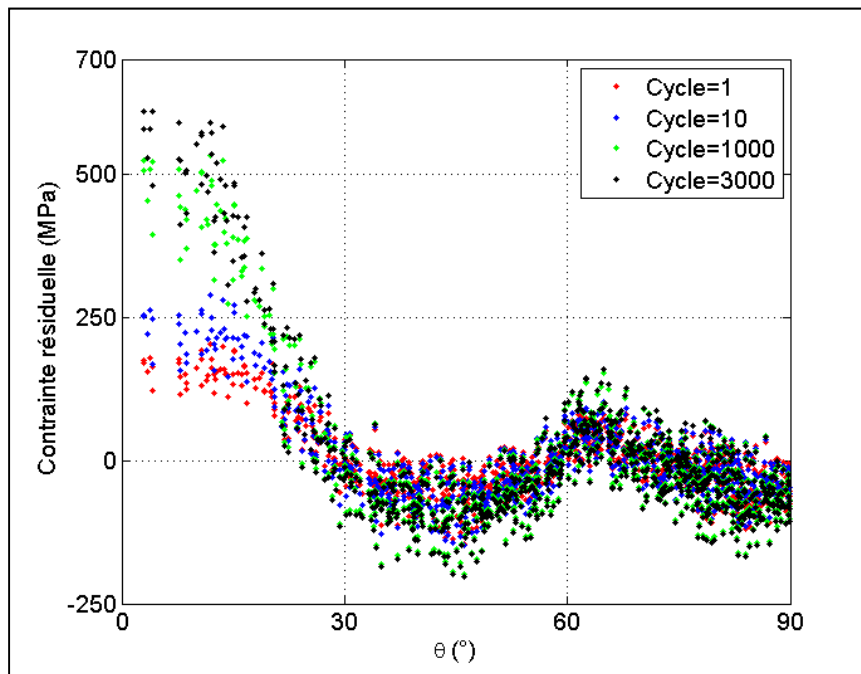


Figure 4-16 Évolution des contraintes résiduelles en fonction des angles  $\theta$  pour une microstructure de 900 cellules après 1, 10, 1000 et 3000 cycles de dwell-fatigue

La Figure 4-17 illustre la moyenne, le maximum et le minimum de la distribution des contraintes résiduelles en fonction des angles  $\theta$  moyens (sur des intervalles de  $10^\circ$ ) pour le  $3000^{\text{ème}}$  cycle de dwell-fatigue. La dispersion est plus prononcée pour des cellules ayant des angles  $\theta$  entre  $10^\circ$  et  $30^\circ$ . Cela peut être dû au fait que ces cellules possèdent des orientations cristallographiques intermédiaires qui rendent leurs contraintes résiduelles plus sensibles au voisinage. Ces cellules peuvent avoir une contrainte élevée et également une déformation inélastique importante, tandis que les cellules dures ( $\theta < 10^\circ$ ) se déforiment très peu et les cellules ayant des angles  $\theta$  plus grands ( $\theta > 30^\circ$ ) se déforiment plastiquement et normalement leurs contraintes n'atteignent pas des niveaux élevés. Donc, le comportement des cellules orientées de  $10^\circ$  à  $30^\circ$  peut varier en tension et en compression dépendant de leurs voisinages.

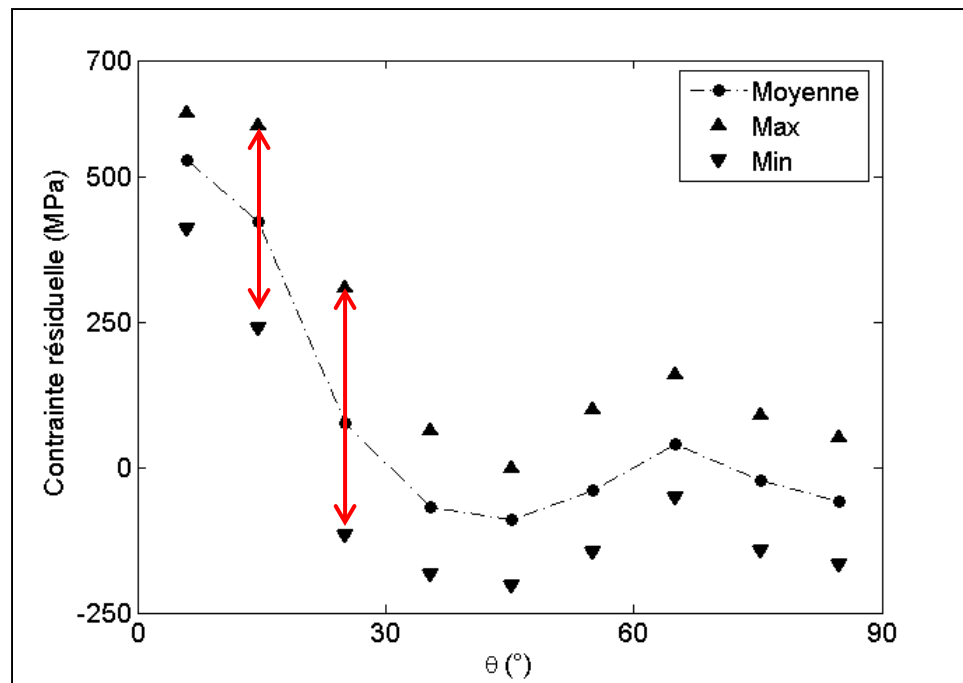


Figure 4-17 Dispersion des contraintes résiduelles moyennes en fonction des angles  $\theta$  moyens pour une microstructure de 900 cellules au  $3000^{\text{ème}}$  cycle de dwell-fatigue

### 4.3.3 Effet du temps de maintien sur le comportement mécanique macroscopique et local

Comme mentionné dans le premier chapitre, l'augmentation du temps de maintien favorise l'accumulation de la déformation plastique dans les grains susceptibles de se déformer, ce qui peut conduire à la diminution de la durée de vie des alliages de titane en dwell-fatigue. Pour vérifier que le modèle développé dans cette étude est capable de modéliser cet effet, des essais en dwell-fatigue sont effectués avec différents temps de maintien et sous un niveau de contrainte de 855 MPa (90% de la limite d'élasticité conventionnelle de Ti-6-4) sur une microstructure non texturée. La Figure 4-18 montre la déformation inélastique cumulée durant 3000 cycles de dwell-fatigue. On remarque que le niveau de déformation augmente avec l'augmentation du temps de maintien. Cela est en accord avec les observations expérimentales. D'autre part, pour un essai de fatigue pure (temps de maintien nul), la déformation sature après quelques cycles. La saturation de la déformation principalement est due à l'écroutissage. Lorsqu'un matériau se déforme sa cission critique évolue et la continuation de la déformation nécessite un niveau de contrainte plus élevé. Ainsi, pour mieux modéliser le comportement en fatigue il faut prendre en compte les effets de l'adoucissement cyclique lors de décharge par un écroutissage cinématique. Avec la contrainte maximale constante lors de fluage, la déformation du matériau sature et il s'arrête de se déformer en l'absence de contrainte appliquée plus élevée.

La Figure 4-19 montre la distribution de la déformation inélastique locale au 3000<sup>ème</sup> cycle en fonction de l'angle  $\theta$  pour différents temps de maintien dans la même microstructure. On constate que cette distribution suit le même comportement pour les trois durées de maintien étudiées, cependant, plus le temps de maintien est élevé, plus la déformation inélastique augmente dans les cellules.

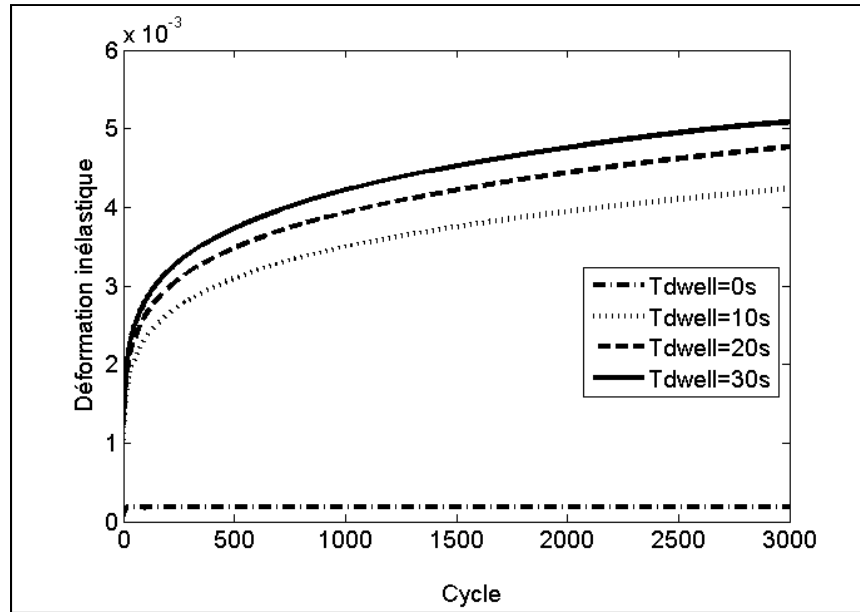


Figure 4-18 Déformation inélastique cumulée pour différent temps de maintien dans une microstructure non texturée sous une contrainte de 855 MPa

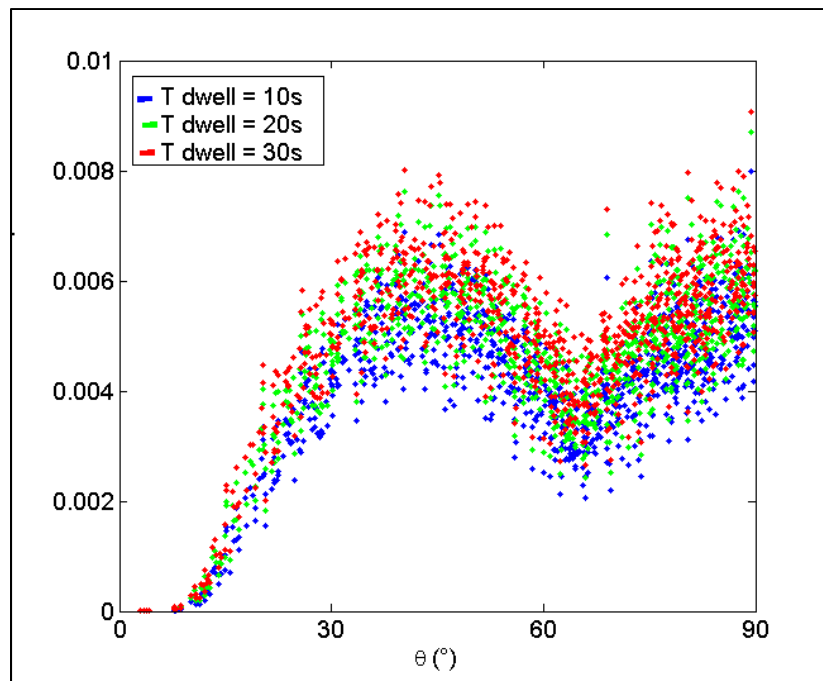


Figure 4-19 Comparaison de la distribution de la déformation inélastique cumulée pour différent temps de maintien au 3000<sup>ème</sup> cycle dans une microstructure non texturée sous une contrainte de 855 MPa

#### **4.3.4 Capacité du modèle AC pour la prédiction de l'endommagement local**

Dans le premier chapitre, trois mécanismes d'endommagement des alliages de titane en dwell-fatigue ont été présentés. Ces mécanismes sont basés, respectivement, sur la contrainte normale maximale, la déformation plastique maximale et un mécanisme pondérant la contrainte normale et la déformation plastique. Le modèle AC permet de tester ces trois critères et d'identifier les cellules favorables pour l'amorçage des fissures. Ces cellules possèdent des contraintes et des déformations élevées. Pour identifier certaines cellules critiques, une microstructure non texturée de 900 cellules ayant subi 3000 cycles de dwell-fatigue sous 855 MPa de contrainte macroscopique et 30s temps de maintien est étudiée. Au 3000<sup>ème</sup> cycle, quatre cellules avec des comportements mécaniques intéressants sont détectées dans cette microstructure. Les placements de ces cellules et leurs voisinages sont illustrés dans la Figure 4-20.



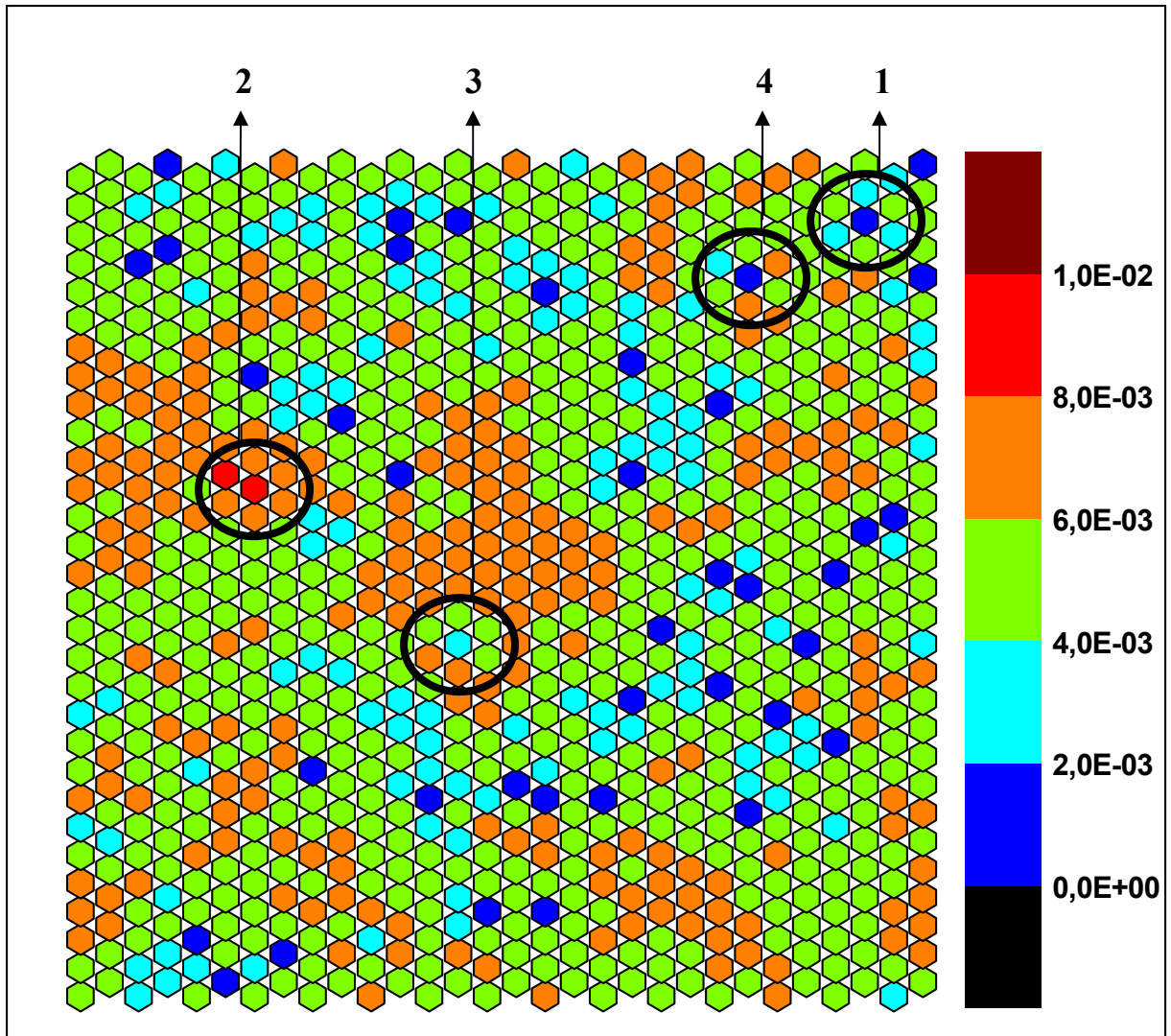


Figure 4-20 Localisation de déformation inélastique dans une microstructure non texturée de 900 cellules au 3000<sup>ème</sup> cycle sous un chargement de 855 MPa de contrainte macroscopique et 30s du temps de maintien

Pour pouvoir mieux comprendre le comportement local de ces cellules, leurs propriétés et celles de leurs voisinages sont détaillées dans le Tableau 4.4.

Tableau 4.4 Propriétés des quatre cellules étudiées et leurs voisinages

Cellule	$\theta$ (°)	$f_{Sch}^C$	$E^C$ (GPa)	$\theta$ (°) Voisinage	$\epsilon_{in\acute{e}lastique}^C$	$\langle \epsilon_{in\acute{e}lastique}^C \rangle_V$	$\sigma^C$ (MPa)	$\sigma_{res}^C$ (MPa)
<b>1 (838)</b>	4,2	0,0643	143	24, 82, 61, 78, 27, 37	1,1e-6	0,0047	1568	616
<b>2 (199)</b>	89,5	0,4863	104	42, 40, 45, 44, 44, 39	0,0091	0,0075	796	-51
<b>3 (403)</b>	19	0,2847	136	49, 38, 80, 79, 54, 84	0,0030	0,0059	1267	361
<b>4 (716)</b>	16.8	0,2523	137	73, 66, 86, 86, 53, 78	0,0017	0,0051	1316	426

La cellule 1 est intéressante pour son niveau de contrainte. En effet, elle possède la contrainte maximale parmi toutes les cellules dans la microstructure. Cette cellule avec son axe  $c$  quasiment parallèle à l'axe de chargement est défavorablement orientée pour la déformation. Elle possède une cission critique très élevée et un facteur de Schmid faible. Par conséquent, sa déformation inélastique est très faible et selon le troisième critère d'endommagement (basée sur la contrainte normale élevée et la déformation inélastique importante) elle n'est pas une bonne candidate pour l'amorçage de fissure. Cependant, selon le critère d'endommagement basé sur la contrainte normale maximale, soutenue par certains auteurs (Bache, 1997; Dunne, 2007), cette cellule peut avoir un potentiel d'amorçage de fissure.

La deuxième cellule choisie expérimente la déformation inélastique maximale parmi toutes les cellules de la microstructure. Elle est une cellule orientée à 89,5° de l'axe de chargement et son facteur de Schmid est élevé et son module d'élasticité est faible. Elle est très favorablement orientée pour la déformation plastique. Son plan de glissement prismatique se déformera à des niveaux de contrainte relativement faible, par contre elle s'est déformée plus que des orientations équivalentes. Comme on voit dans le Tableau 4.4, cette cellule est entourée par six cellules voisines molles et ses voisins sont aussi favorablement orientés pour le glissement basal. L'ensemble de cette cellule et son voisinage constitue une région molle

dans la microstructure. Cette cellule est intéressante pour sa déformation inélastique maximale, mais elle ne peut pas être critique pour l'amorçage de fissure car sa contrainte est faible. Selon les études expérimentales, les cellules critiques ne possèdent pas seulement des déformations inélastiques importantes, mais aussi des contraintes élevées, ce qui n'est pas le cas pour cette cellule.

La cellule 3 est une cellule dure avec un angle  $\theta$  de  $19^\circ$ , un facteur de Schmid et un module d'élasticité intermédiaire. Par ailleurs, le voisinage de cette cellule est constitué de six cellules favorablement orientées pour la déformation. Comme on voit sur la Figure 4-20, les cellules voisines de cette cellule sont déformées plus que la cellule elle-même (voir le Tableau 4.4). En conséquence, le voisinage transfère sa déformation sur cette cellule, ce qui augmente sa contrainte. Cette cellule est un exemple des cellules qui ont des comportements critiques selon le troisième critère d'endommagement et elle peut être une bonne candidate pour l'amorçage de fissure. En effet, si l'on regarde la carte des contraintes au 3000<sup>ème</sup> cycle pour cette microstructure, on constate que cette cellule possède une contrainte bien plus élevée que son voisinage (Figure 4-21).

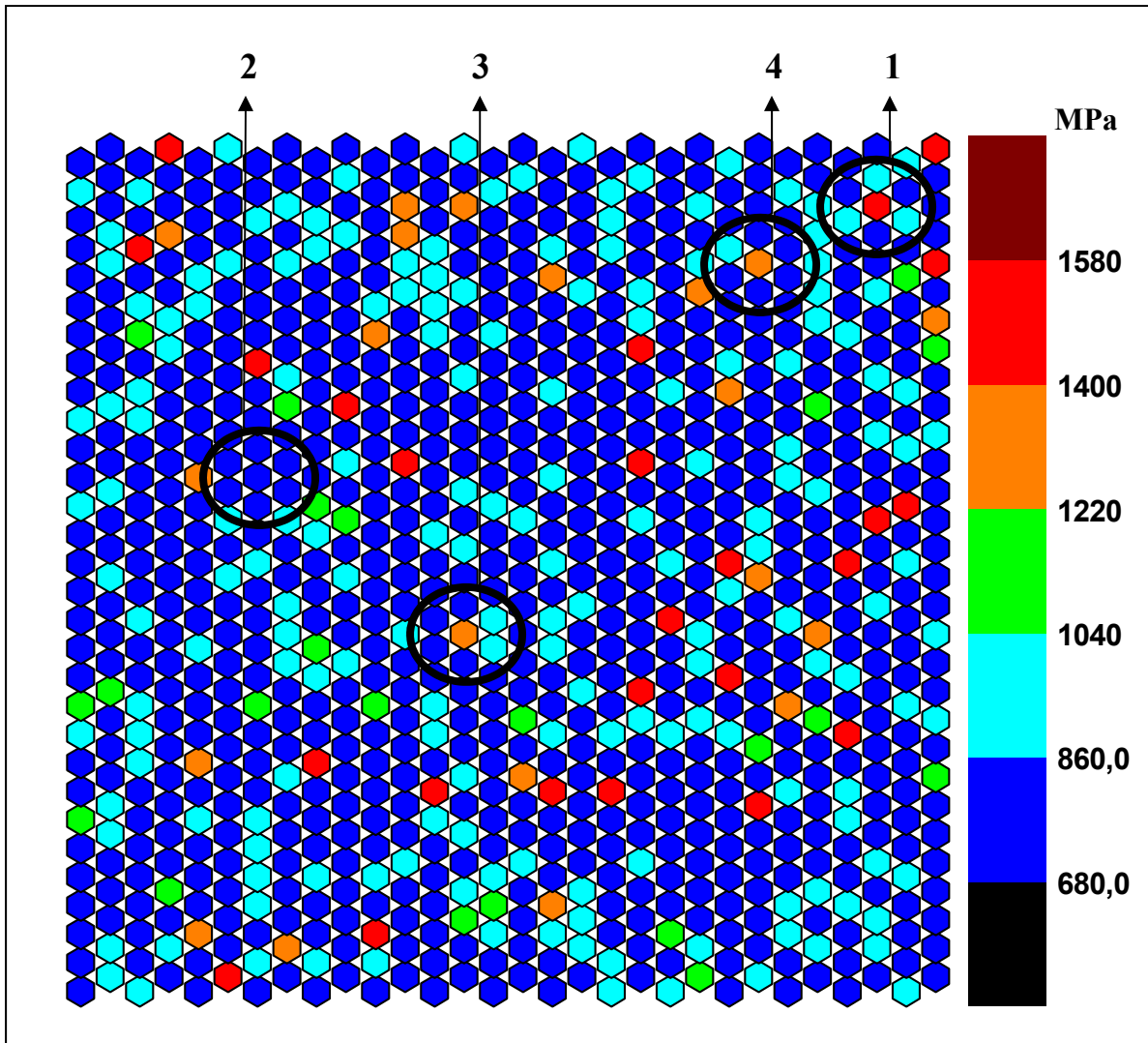


Figure 4-21 Localisation de contrainte dans une microstructure non texturée de 900 cellules au 3000<sup>ème</sup> cycle sous un chargement de 855 MPa de contrainte macroscopique et 30s du temps de maintien

La dernière cellule est similaire à la cellule 3, mais elle est plus dure de par son orientation cristallographique et sa limite d'élasticité. La Figure 4-20 et Figure 4-21 montrent, respectivement, la déformation et la contrainte de cette cellule. Elle se déforme moins que ses voisines (voir le Tableau 4.4) et elle a une contrainte plus élevée. Comme dans le cas précédent, le voisinage transfère sa charge sur cette cellule et augmente sa contrainte. Cette cellule aussi peut être critique pour l'amorçage de fissure.

De manière générale, en comparant la Figure 4-20 avec la Figure 4-21 on note que les cellules ayant des déformations élevées ont des contraintes faibles et à l'inverse, des cellules avec une faible déformation inélastique possèdent des contraintes élevées. Cependant, certaines cellules possèdent des niveaux de contraintes et de déformation importants.

D'après les résultats expérimentaux, l'amorçage de fissure arrive dans des cellules ayant une contrainte normale élevée sur les plans basaux et aussi un niveau de déformation plastique importante. Ces cellules favorables pour l'amorçage de fissure sont orientées de  $15^\circ$  à  $20^\circ$  par rapport à l'axe de chargement et sont entourées par des cellules voisines relativement molles. Dans la microstructure étudiée, les cellules 3 et 4 sont des cellules de ce type et peuvent être considérées comme critiques. La Figure 4-22 illustre la localisation des contraintes normales sur les plans basaux des cellules. Il est possible de distinguer sur cette figure les cellules ayant des contraintes normales élevées sur leurs plans basaux. Les cellules 3 et 4 étudiées dans cette microstructure possèdent des contraintes normales sur leur plan basal égales à 1200 MPa et 1260 MPa, respectivement.

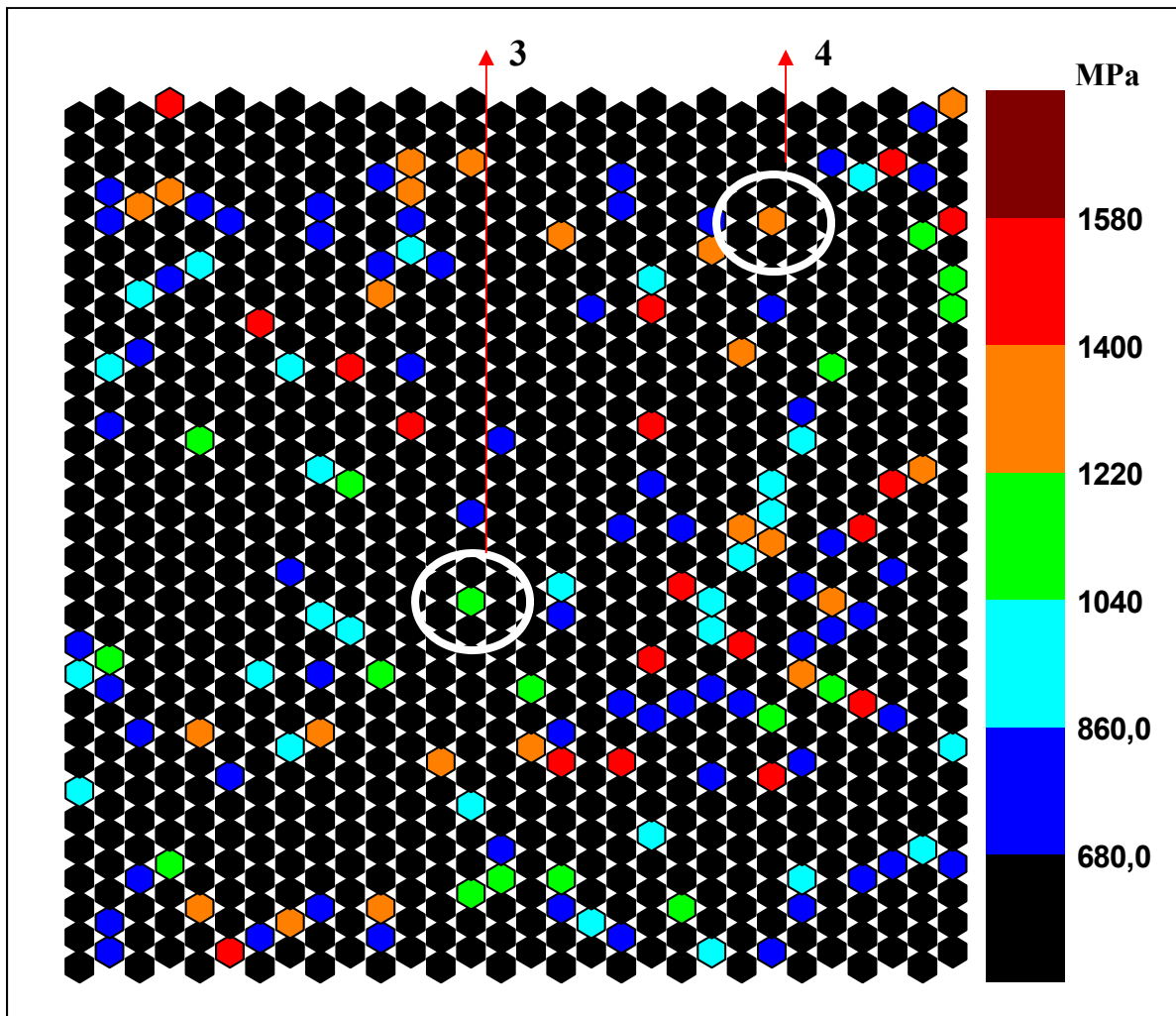


Figure 4-22 Localisation de contrainte normale sur le plan basal des cellules dans une microstructure non texturée de 900 cellules au 3000<sup>ème</sup> cycle sous un chargement de 855 MPa de contrainte macroscopique et 30s du temps de maintien

La Figure 4-23a et Figure 4-23b montrent l'évolution de la déformation et de la contrainte pour ces deux cellules, respectivement. On remarque que la déformation et la contrainte continue à augmenter pour les deux cellules au cours de cyclage.

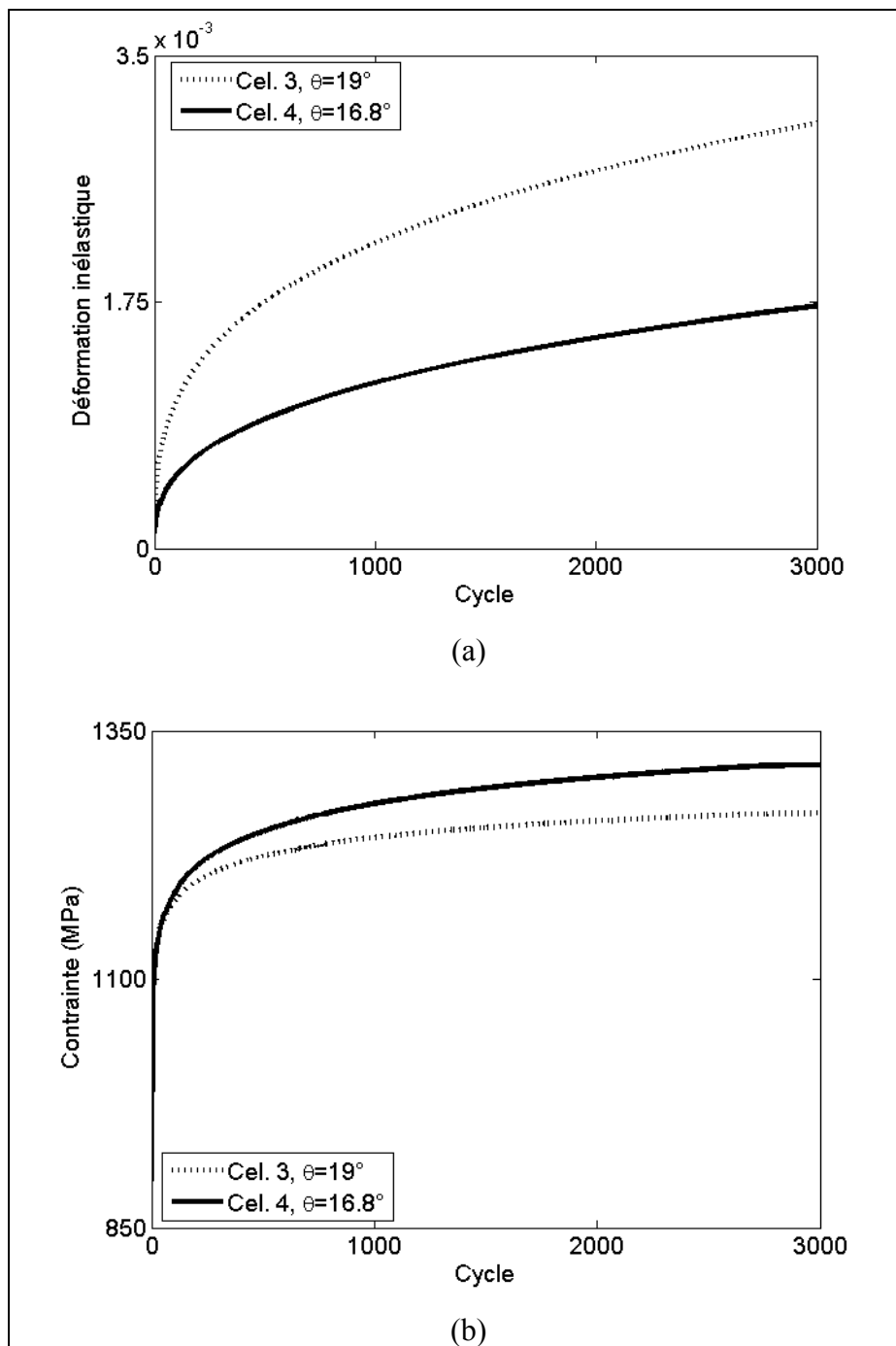


Figure 4-23 Évolution de (a) la déformation inélastique et (b) la contrainte au cours du chargement dans les deux cellules 3 et 4

Dans cette partie de l'étude et dans le but de montrer le rôle de voisinage dans la localisation et les comportements locaux, deux autres microstructures sont étudiées. Cependant, ces

microstructures sont générées en utilisant les mêmes orientations cristallographiques de la microstructure étudiée précédemment (Figure 4-20) distribuées différemment, toujours de façon aléatoire. Ces deux microstructures ont subi aussi 3000 cycles de dwell-fatigue sous une contrainte de 855 MPa et 30s de temps de maintien. La Figure 4-24 illustre la localisation de la déformation et de la contrainte pour la deuxième et la troisième microstructure. En comparant les trois figures (Figure 4-20, Figure 4-21 et Figure 4-24 ) on peut tout de suite remarquer une différence de localisation en déformation et en contrainte pour les trois microstructures. Les cellules dans ces trois microstructures se trouvent entourées par des voisins différents et elles se comportent différemment. Cela conduit à des localisations différentes mais également à des valeurs différentes.



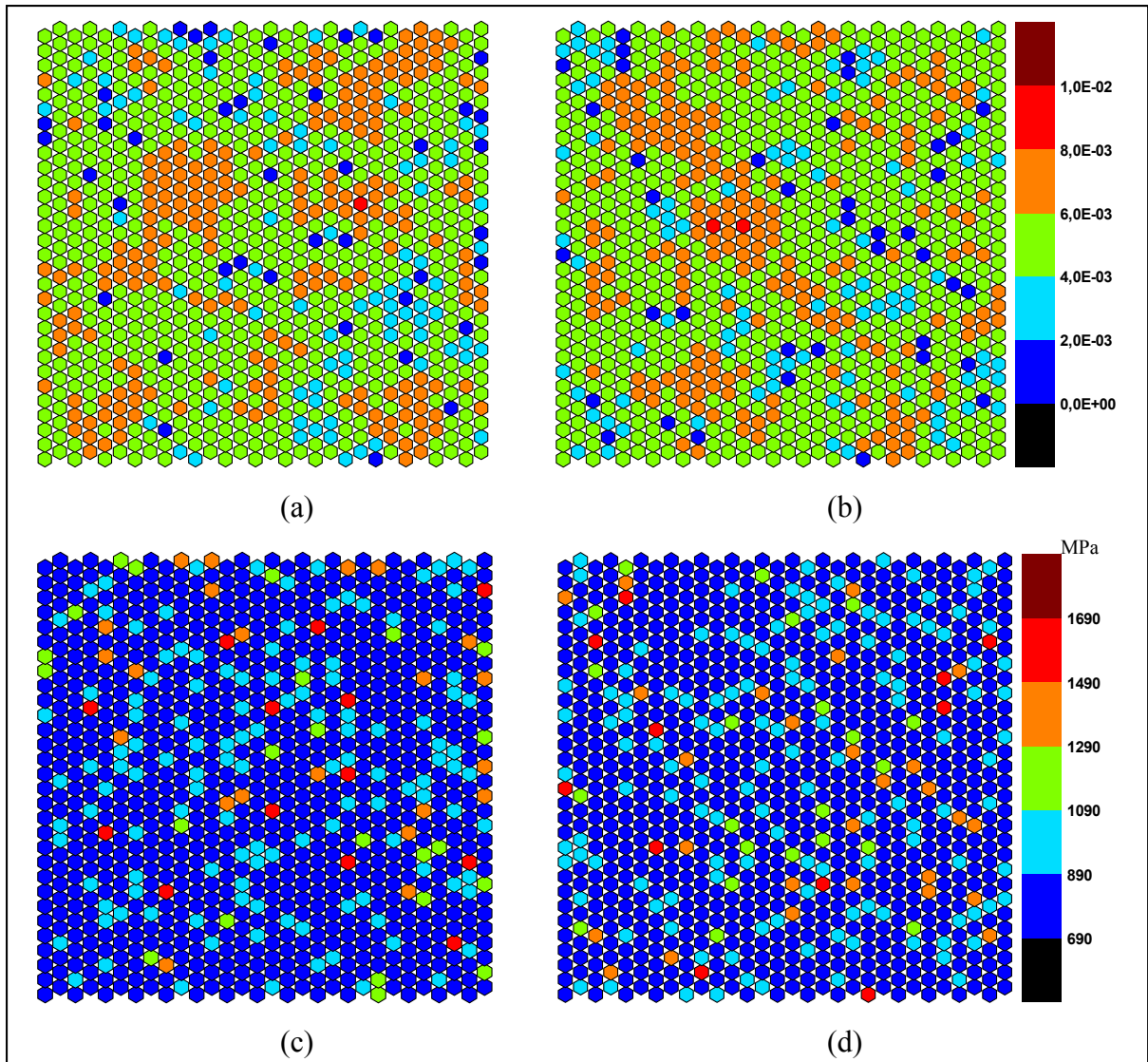


Figure 4-24 (a) Localisation de la déformation et (b) de la contrainte dans la microstructure 2 et (c) localisation de la déformation et (d) de la contrainte dans la microstructure 3

Les cellules en détail étudiées précédemment dans la première microstructure ont été repérées dans les microstructures 2 et 3. Ces cellules ne possèdent plus les caractéristiques décrites précédemment car leurs voisinages changent. En particulier, le Tableau 4.5 indique les déformations de les contraintes des cellules 1 et 2 dans les trois microstructures étudiées.

On note que pour la cellule 2, la contrainte est plus faible dans les deux microstructures 2 et 3 et en conséquence le niveau de déformation est moins élevé. Le niveau de la contrainte résiduelle est par contre plus élevé pour cette cellule dans la microstructure 3 par rapport les deux autres. En effet, la cellule 2 se déforme moins que son voisinage dans la microstructure 3, ce qui n'est pas le cas dans les deux autres microstructures. Cela introduit un transfert de la déformation du voisinage à la cellule dans la microstructure 3. Ce transfert de charge augmente la contrainte dans la cellule et puisque la cellule est favorablement orientée pour la déformation, elle se trouve en compression et sa contrainte résiduelle augmente.

Tableau 4.5 Contrainte et de déformation des cellules 1 et 2 dans les trois microstructures étudiées

Microstructure	Cellule 1 ( $\theta=4,2^\circ$ )			Cellule 2 ( $\theta=89,5^\circ$ )		
	$\varepsilon_{in\acute{e}lastique}^C$	$\sigma^C$ (MPa)	$\sigma_{res}^C$ (MPa)	$\varepsilon_{in\acute{e}lastique}^C$	$\sigma^C$ (MPa)	$\sigma_{res}^C$ (MPa)
1	1,1e-6	1568 (max)	616	0,0091 (max)	796	-51
2	9,8e-7	1520	586	0,0072	767	-55
3	1e-6	1552	620	0,0055	725	-111

La cellule 1, dans les trois microstructures étudiées, possède un niveau de déformation faible grâce à son orientation cristallographique (cellule dure). Son niveau de contrainte change d'une microstructure à l'autre, mais il reste toujours élevé. Dû à son voisinage, elle possède la contrainte maximale par rapport des autres cellules dans la microstructure 1 et elle perd cette place dans les deux autres microstructures.

Au cours du chargement, le comportement de certains grains varie dû à l'évolution de comportement de leur voisinage. Le modèle AC est capable de modéliser l'interaction du comportement entre les cellules pour simuler ce changement. Par exemple, la Figure 4-25 montre le changement de la contrainte d'une cellule avec un angle  $\theta$   $73^\circ$  dans la microstructure 1. La contrainte change dans cette cellule aux différents cycles à cause du transfert de charge entre elle et son voisinage. La contrainte continue à augmenter dans cette cellule jusqu'à un certain nombre de cycles ( $\approx 900$  cycles), puis elle reste relativement constante au cours des prochains cycles et elle chute après environ 2800 cycles. La chute de contrainte peut être expliquée par le changement du comportement de ses cellules voisines. Probablement, le voisinage commence à se déformer.

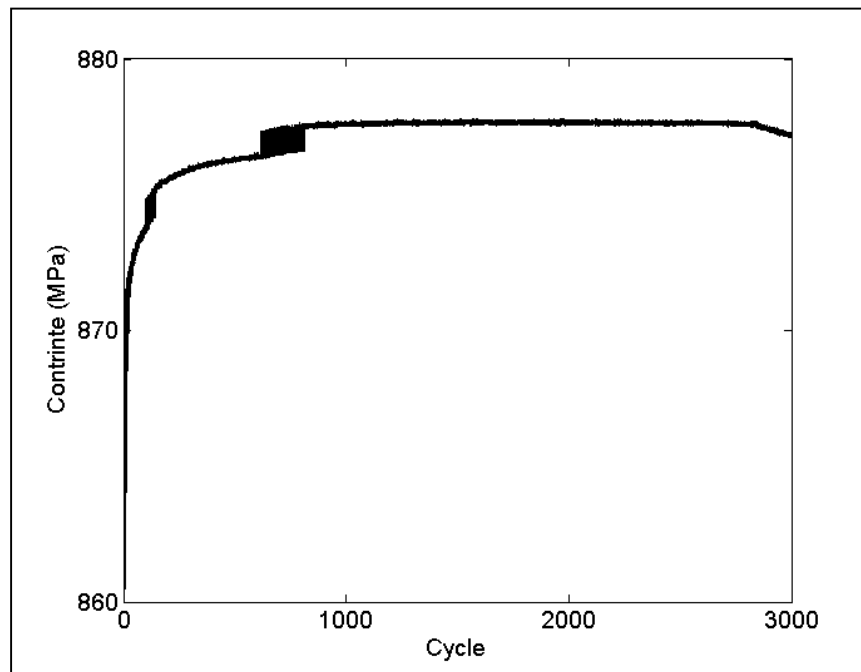


Figure 4-25 Évolution de la contrainte de la cellule 386 au cours du chargement dwell-fatigue

Un autre exemple de changement du comportement des cellules est présenté dans la Figure 4-26. Cette figure montre le changement des contraintes résiduelles d'une cellule avec un angle  $\theta$  de  $59^\circ$  (facteur de Schmid 0.44). On note que cette cellule était en tension au début de chargement et après quelques cycles elle se déforme et se trouve en compression. Après

environ 2800 cycles, le voisinage de cette cellule se déforme et transfère sa charge sur la cellule. Cela augmente la contrainte dans la cellule et elle se trouve en tension. L'évolution de la contrainte de cette cellule est similaire de l'évolution de sa contrainte résiduelle et elle diminue jusqu'à 2800 cycles et augmente par la suite. D'autre part, la déformation inélastique dans cette cellule continue d'augmenter au cours de cyclage, mais la vitesse de déformation diminue considérablement à 2800<sup>ème</sup> cycle due à la déformation du voisinage.

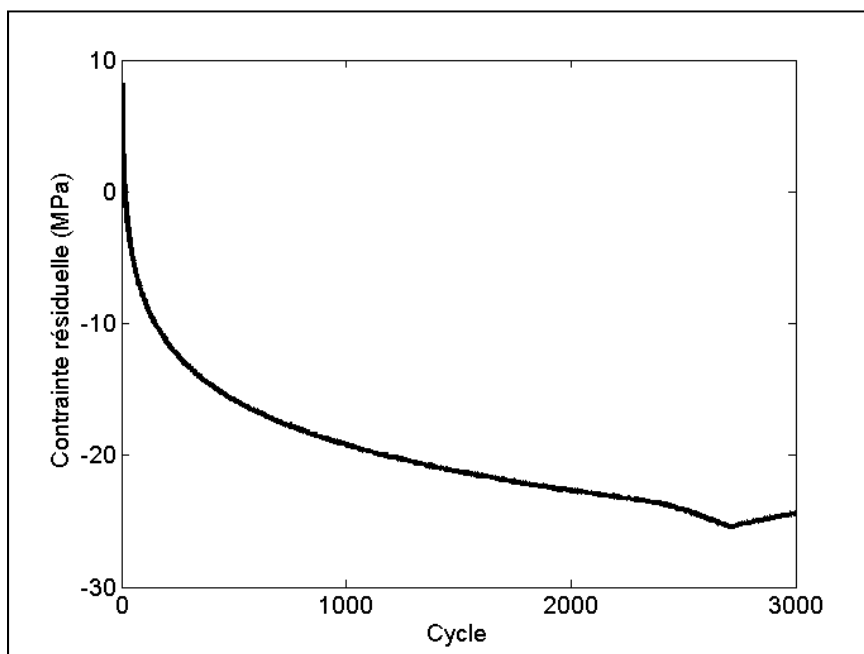


Figure 4-26 Évolution de la contrainte résiduelle de la cellule 25 au cours de 3000 cycles de dwell-Fatigue

Le modèle AC permet d'étudier différentes cellules avec des comportements particuliers dépendant de leurs orientations cristallographiques et celles de leurs voisins. Dans le but d'amélioration du modèle, des critères d'endommagement peuvent être ajoutés afin de prendre en compte des mécanismes de déformation et identifier les cellules favorables pour l'amorçage des fissures. Ces mécanismes peuvent aussi prédire la durée de la vie d'une microstructure en dwell-fatigue.

#### 4.3.5 Étude statistique sur une microstructure de 10000 cellules

Un des avantages du modèle AC est sa capacité à simuler un grand nombre de cellules ayant des comportements locaux complexes sous grand nombre de cycles avec un temps de calcul court. Pour montrer cette capacité, un essai de 2500 cycles en dwell-fatigue est effectué sur une microstructure de 10000 cellules générée par les AC sous une contrainte de 855 MPa et 30s du temps de maintien. La localisation de la déformation plastique dans cette microstructure est illustrée dans la Figure 4-27.

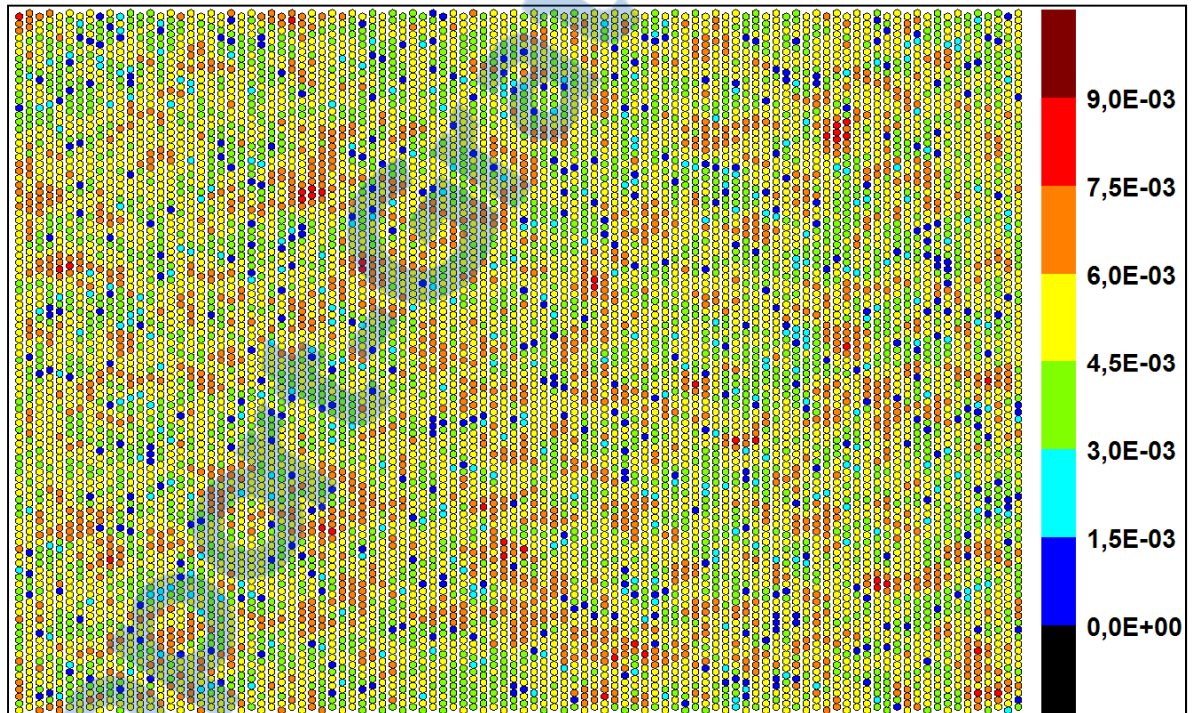


Figure 4-27 Localisation de la déformation inélastique dans une microstructure non texturée de 10000 cellules après 2500 cycles de dwell-fatigue sous une contrainte de 855 MPa et 30s du temps de maintien

Dans cette étude un critère mixte permet d'identifier les cellules critiques selon le troisième critère d'endommagement. Ce critère identifie des cellules ayant à la fois une contrainte plus élevée que 1300 MPa et une déformation inélastique supérieure à 0,002. Avec une étude statistique en utilisant ce critère, le modèle AC permet d'identifier les cellules critiques. Un

carré jaune sur la Figure 4-28 montre 15 cellules (sur 10000) identifiées comme critiques selon ce critère. Toutes ces cellules sont orientées de 15° à 20° par rapport à l'axe de chargement.

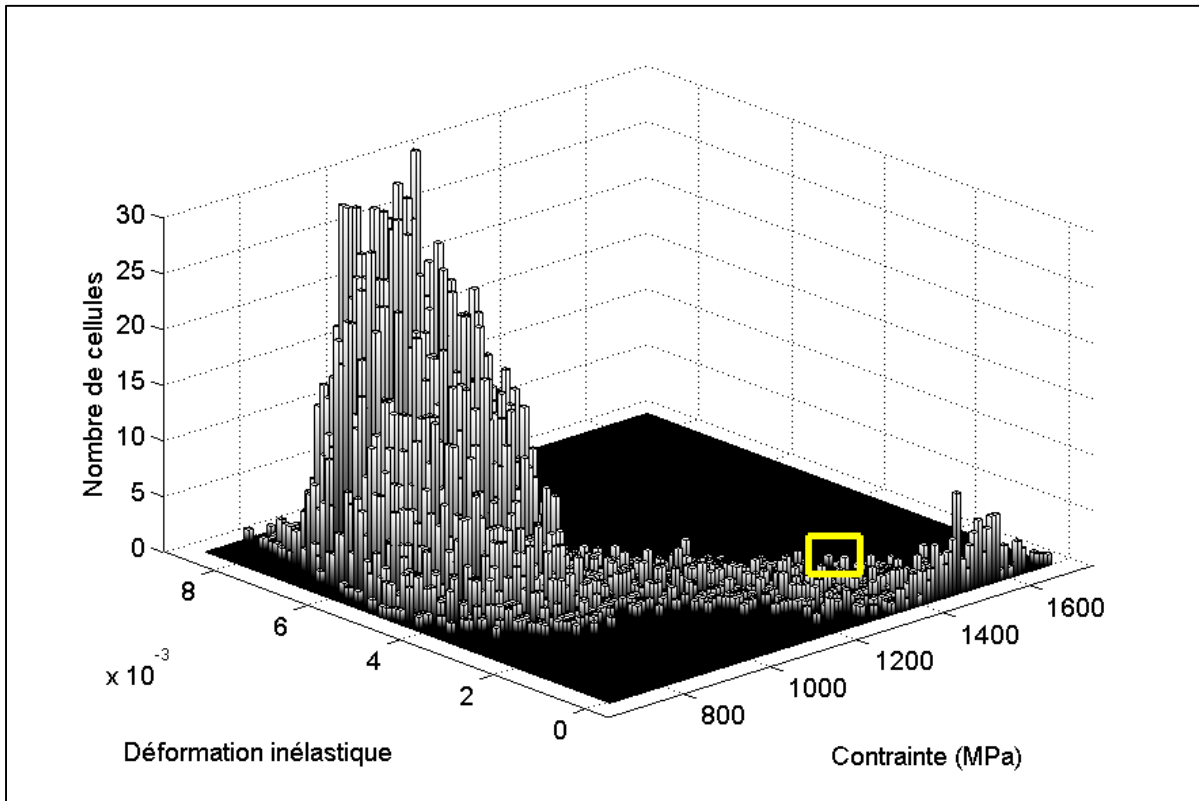


Figure 4-28 Identification des cellules critiques selon un critère mixte ( $\sigma^C > 1300MPa$  et  $\varepsilon^C > 0,002$ ) dans une microstructure non texturée de 10000 cellules au 2500<sup>ème</sup> cycle de dwell-fatigue sous une contrainte de 855 MPa et 30s du temps de maintien

Comparant avec d'autres méthodes de simulation, le modèle AC reste très avantageux en termes de temps de calcul et le nombre des cellules modélisées. Par exemple, effectuer 2500 cycles de dwell-fatigue sur un agrégat de 10000 grains en ÉF est quasiment impossible, car même avec des moyens informatiques développés le temps de calcul reste très élevé. Cependant, les calculs par AC sont effectués sur une poste informatique standard ayant un processor de 2.79GHz et une mémoire de vive de 3Go. Le temps de calcul de chaque cycle en dwell-fatigue pour un AC de 900 et 10000 cellules est de 4s et 43s, respectivement.

#### 4.4 Synthèse du chapitre

Dans ce chapitre, deux approches mathématiques ont été présentées pour modéliser le comportement en fluage des alliages de titane. Après les comparaisons des résultats obtenus par les deux approches, l'approche la plus adaptée est choisie pour modéliser le fluage à l'échelle des cellules. Cette approche est du type puissance et elle basée sur la plasticité cristalline. Les paramètres mathématiques de cette approche sont obtenus par l'ajustement des courbes numériques sur les courbes expérimentales pour différents niveaux de contrainte.

Un essai de 3000 cycles en dwell fatigue est effectué sur une microstructure non texturée de 900 cellules sous une contrainte de 855 MPa et 30s du temps de maintien. La distribution de la déformation inélastique et la contrainte au 3000<sup>ème</sup> cycle montrent trois zones intéressantes dans la microstructure. La première zone concerne des cellules dures qui sont orientées de 0 ° à 10 ° par rapport l'axe du chargement. Ces cellules ne déforment pas ou elles déforment très peu, mais elles possèdent des contraintes très élevées. À cause de leurs orientations cristallographiques défavorables pour la déformation, elles sont toujours en tension avec des contraintes résiduelles élevées. La deuxième zone, au contraire de la première, concerne des cellules qui déforment le plus dans la microstructure. Ces cellules ont des facteurs de Schmid élevés et des cissions critiques faibles. Elles sont favorablement orientées pour un glissement basal ou prismatique. À cause de leurs déformations élevées, les contraintes dans ces cellules chutent et elles se trouvent, normalement, en compression avec des contraintes résiduelles élevées, mais négatives. Les contraintes résiduelles sont plus élevées pour des cellules ayant un glissement basal. Les cellules avec la déformation inélastique maximale et la contrainte minimum se trouvent dans cette zone. La troisième zone regroupe des cellules ayant des champs des contraintes et des déformations intermédiaires. Les cellules critiques avec des niveaux des contraintes élevées et des niveaux des déformations importantes sont dans cette zone. Le modèle AC a la capacité de détecter et identifier ces cellules et traquer leurs comportements au cours du cyclage.

Dans ce chapitre, trois microstructures avec les mêmes orientations cristallographiques, mais distribuées aléatoirement sont modélisées en dwell-fatigue afin d'étudier des cellules intéressantes avec des comportements critiques ou particuliers. Cette étude montre que les cellules critiques sont orientées de  $15^\circ$  à  $20^\circ$  de l'axe de chargement et sont entourées par des cellules relativement favorables pour la déformation. Lors du chargement, leurs voisinages déforment plus que ces cellules critiques elles-mêmes et ils transfèrent sa charge sur ces cellules qui augmente la contrainte dans ces cellules. Avec leur déformation plastique importante et leur niveau de contrainte élevée, ces cellules construisent des bons sites d'amorçage de fissure.

L'effet du temps de maintien a été étudié aussi dans ce chapitre. En résumé, plus le temps du maintien est élevé plus la déformation plastique est importante. En effet, le temps du maintien favorise l'accumulation de la déformation plastique dans la microstructure et le modèle AC est capable de modéliser cet effet. Finalement, le modèle AC est capable de modéliser un grand nombre des cellules avec des comportements complexes sous un chargement complexe comme le dwell-fatigue dans une période du temps court. Ces propriétés sont de grands avantages de ce modèle que les différencient des autres modèles de simulation.



## CONCLUSION

Trois modèles mathématiques utilisant des automates cellulaires (AC) ont été développés dans cette étude pour modéliser les comportements mécaniques de la phase HCP des microstructures de titane en élasticité, élastoplasticité et en dwell-fatigue. Chaque grain a été modélisé par une cellule à laquelle ont été attribuées des propriétés cristallographiques et mécaniques afin de simuler des microstructures réalistes. Les trois angles d'Euler ont été utilisés pour définir les orientations des cellules et les modules de Young ont été calculé en fonction des angles  $\theta$  (l'angle entre l'axe  $c$  de la maille hexagonale et la direction de chargement). Comme le comportement de chaque cellule dépend du comportement de son voisinage plusieurs configurations ont été testées. Aussi, une règle de transitions d'échelle basée sur la théorie d'inclusion d'Eshelby a été adaptée et utilisée pour la localisation de la déformation dans les cellules. Le comportement global de la microstructure a été caractérisé par la moyenne des comportements de toutes les cellules.

Différentes microstructures non texturées ont été générées par ces modèles et les comportements mécaniques ont été étudiés à l'échelle globale ainsi qu'à l'échelle locale et cela pour différents types de chargement. À l'échelle des cellules, la distribution et la moyenne des déformations et des contraintes, ainsi que l'effet d'entraînement du voisinage ont été étudiés. En élasticité et élastoplasticité, les résultats obtenus par les modèles AC ont été comparés avec les résultats d'un agrégat polycristallin modélisé par la méthode ÉF. En dwell-fatigue une description simplifiée a été utilisée, les comportements global et local du modèle ont été comparés avec les résultats obtenus par des observations expérimentales.

En élasticité et en élastoplasticité, les modèles AC ont été validés avec un modèle ÉF. À l'échelle macroscopique et à l'échelle des cellules, les résultats obtenus par ces modèles sont en accord avec ceux obtenus par le modèle ÉF, particulièrement en terme de la distribution en déformation et en contrainte et également en terme de la moyenne de ces champs mécaniques. Cependant, le calcul des propriétés du voisinage comme étant la moyenne des propriétés de seulement six cellules voisines en AC crée une corrélation linéaire entre des

cellules et leurs voisinages. Cette corrélation peut être aussi observée par le modèle ÉF en limitant le nombre des voisins à six et gardant le facteur de Kearns du voisinage constant. Aussi, le choix de remplacer l'anisotropie des cellules par un comportement isotrope hétérogène qui cause une égalité des champs mécaniques dans les directions 11 et 22 pour un essai de traction selon la direction 33. Ce comportement n'a pas été observé dans le modèle ÉF car ce modèle ne contient pas aucune hypothèse sur l'anisotropie. Ainsi, par l'étude en élastoplasticité, le choix d'un seul système de glissement dans les modèles AC écarte son comportement de celui du modèle ÉF pour l'orientation ( $0^\circ, 45^\circ, 30^\circ$ ). En ce qui concerne les contraintes résiduelles après la décharge, l'AC donne une estimation écartée, mais acceptable par rapport les ÉF. Les résultats obtenus en élasticité et en élastoplasticité par les deux modèles AC et ÉF ont été soumis sous formes de deux articles dans le journal « Computational Materials Science ».

Le comportement mécanique des microstructures non texturées a été modélisé pour 3000 cycles de dwell-fatigue par un modèle AC qui décompose le dwell-fatigue en trois étapes de charge, maintien en charge maximale et décharge. À l'échelle macroscopique, ce modèle donne des résultats intéressants et proches de ceux observés expérimentalement. En terme de la localisation en déformation et en contrainte, trois types de comportement se distinguent. Les contraintes maximales sont localisées dans une zone contenant des cellules dures avec des angles  $\theta$  entre  $0^\circ$  et  $10^\circ$  et les déformations maximales se trouvent dans la zone avec des cellules orientées entre  $30^\circ$  et  $60^\circ$  (système de glissement basal) et entre  $70^\circ$  et  $90^\circ$  (système de glissement prismatique). Les cellules susceptibles à l'amorçage de fissure, selon le critère d'endommagement pondérant à la fois la contrainte normale et la déformation plastique maximale, se trouvent dans la zone contenant des cellules ayant des déformations et des contraintes intermédiaires avec des facteurs de Schmid basal (angles  $\theta$  entre  $10^\circ$  et  $30^\circ$ ). La contrainte normale sur les plans basaux et la déformation plastique dans ces cellules peuvent attendre à des niveaux critiques pour l'amorçage des fissures. Ainsi, pour un angle  $\theta$  donné une dispersion du comportement est marquée dans les trois zones.

Typiquement, au cours de cyclage les cellules molles se déforment plastiquement et possèdent des contraintes résiduelles en compression, tandis que les cellules dures se déforment très peu et expérimentent des contraintes résiduelles en tension. Cependant, le comportement d'une cellule et celui de son voisinage à l'intérieure d'un AC varient beaucoup. Pour certaines orientations, les cellules d'un AC peuvent se trouver en tension ou en compression dépendamment de leur voisinage. Cela est un des avantages du modèle AC qui permet de modéliser cet effet. Ce modèle permet également de modéliser l'effet du temps de maintien sur l'accumulation de la déformation plastique. Plus le temps de maintien est élevé plus de déformation plastique s'accumule dans la microstructure, ce qui cause une diminution de la durée de vie en dwell-fatigue. Dans le dernier chapitre, une étude statistique sur une microstructure de 10000 cellules sollicitée par 2500 cycles en dwell-fatigue a montré la capacité du modèle AC en terme de modélisation d'un grand nombre des cellules dans une courte durée. Les résultats de ce chapitre, obtenus par le modèle AC en dwell-fatigue, vont être soumis sous forme d'un article prochainement.

Les résultats du modèle AC sont sensibles aux données initiales et des paramètres comme, le module d'érouissage, l'incrément de la charge imposée, la constante du matériau, la sensibilité au temps et au taux de déformation, etc. Ils influencent le comportement mécanique local et global du matériau modélisé.

Malgré leurs hypothèses simplificatrices, les modèles AC développés dans cette étude se sont montrés capables de modéliser le comportement mécanique complexe observés expérimentalement, en élasticité, élastoplasticité et en dwell-fatigue. La méthode des automates cellulaires est un bon moyen pour les études microstructurales qui veulent rendre en compte des différents aspects mécanique, métallurgique et cristallographique d'un matériau. Cette méthode peut être adaptée pour différents matériaux avec différentes structures cristallines sous des chargements complexes.



## RECOMMANDATIONS

Les travaux de recherche effectués dans cette étude peuvent être continués pour améliorer les modèles AC développés afin de mieux modéliser le comportement microstructurale des alliages de titane. A cet effet, les propositions et les pistes intéressantes pour les travaux futurs peuvent être résumés comme :

- Prendre en compte de l'anisotropie cristallographique de la maille hexagonale en utilisant son tenseur de rigidité sans l'hypothèse de coefficient de Poisson constant afin de définir les propriétés élastiques des cellules.
- Prendre en compte de l'effet de la taille et la morphologie des grains par des théories de type Hall-Petch afin de décrire les propriétés morphologiques des cellules.
- Prendre en compte l'activation de plusieurs systèmes de glissement (basal et prismatique) dans une cellule et modéliser l'interaction entre ces systèmes en plasticité.
- Modéliser le comportement mécanique en dwell-fatigue sans le découplage en charge-fluage-décharge. Pour cela, il faut utiliser des lois de comportement plus adaptées qui permettent de calculer à la fois la déformation plastique due à la charge et au fluage à l'échelle locale.
- Ajouter l'érouissage cinématique et l'adoucissement cyclique à la décharge afin d'améliorer la modélisation en fatigue.
- Intégrer des critères d'endommagement afin d'identifier les cellules critiques selon leurs caractéristiques cristallographiques, leurs contraintes et leurs déformations.
- Modéliser des microstructures texturées.
- Modéliser des macrozones où chaque macrozone peut être représentée par une microstructure texturée dans un AC.



## ANNEXE I

### Plans et directions de glissement basal et prismatique d'une maille hexagonale dans un repère orthonormé

Les directions et les plans normaux de systèmes de glissement d'une maille hexagonale sont typiquement définis par quatre composantes dans un repère non orthonormé. Pour calculer les matrices de Schmid pour chaque système de glissement il est préférable d'écrire les directions et les plans de glissement dans un repère orthonormé (3 composantes). Le Tableau 1 montre les directions et les plans de glissement basal et prismatique d'une maille HCP et leurs équivalents dans un repère orthonormé.

Tableau 1 Plans et directions de glissement basal et prismatique d'une maille HCP dans un repère orthonormé

Repère	HCP		Orthonormé	
	Normale de plan $\vec{n}$	Direction $\vec{l}$	Normale de plan $\vec{n}$	Direction $\vec{l}$
<b>Basal</b>	(0001)	$\begin{bmatrix} 12\bar{1}0 \end{bmatrix}$	(001)	$\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{bmatrix}$
	(0001)	$\begin{bmatrix} \bar{1}120 \end{bmatrix}$	(001)	$\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{bmatrix}$
	(0001)	$\begin{bmatrix} 2\bar{1}\bar{1}0 \end{bmatrix}$	(001)	[100]
<b>Prismatique</b>	$\begin{pmatrix} 10\bar{1}0 \end{pmatrix}$	$\begin{bmatrix} 12\bar{1}0 \end{bmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{bmatrix}$
	$\begin{pmatrix} \bar{1}100 \end{pmatrix}$	$\begin{bmatrix} \bar{1}120 \end{bmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{bmatrix}$
	$\begin{pmatrix} 0\bar{1}10 \end{pmatrix}$	$\begin{bmatrix} 2\bar{1}\bar{1}0 \end{bmatrix}$	(0-10)	[100]





## ANNEXE II

### Analyse numérique du comportement élastoplastique

Cette annexe contient deux parties. En première partie le comportement élastoplastique d'un AC homogène est comparé avec la solution analytique afin de valider la programmation du modèle des AC. Pour cela, le calcul a été fait dans un cas isotrope et l'effet de pas de chargement est étudié aussi. La deuxième partie présente l'étude du comportement élastoplastique d'un AC hétérogène à l'échelle macroscopique et microscopique.

#### D) Validation du comportement élastoplastique d'un AC homogène par de calcul analytique :

Dans cette partie, une microstructure homogène en orientation est générée par la méthode des AC. Cette microstructure contient 900 cellules dont toutes les cellules ont la même orientation cristallographique ( $0^\circ, 90^\circ, 15^\circ$ ). Le Tableau 2 montre les données de ce modèle.

Tableau 2      Donnés du modèle AC homogène isotrope

<b>Constantes élastiques (GPa)</b>	$C_{11} = 2\mu + \lambda$	150
	$C_{12} = \lambda$	50
	$C_{66} = 2\mu$	100
<b>Coefficient de Poisson</b>	$\nu$	0.25
<b>Module de Young (GPa)</b>	E	125
<b>Module d'écroutissage</b>	H	8500
<b>Seuil de plasticité (MPa)</b>	$\sigma_y$	750

Un tenseur de contrainte avec une seule composante non nulle  $\sigma_{33} = 920 \text{ MPa}$  a été imposé sur la microstructure homogène. La Figure 1 montre la réponse de la microstructure par une courbe de contrainte-déformation.

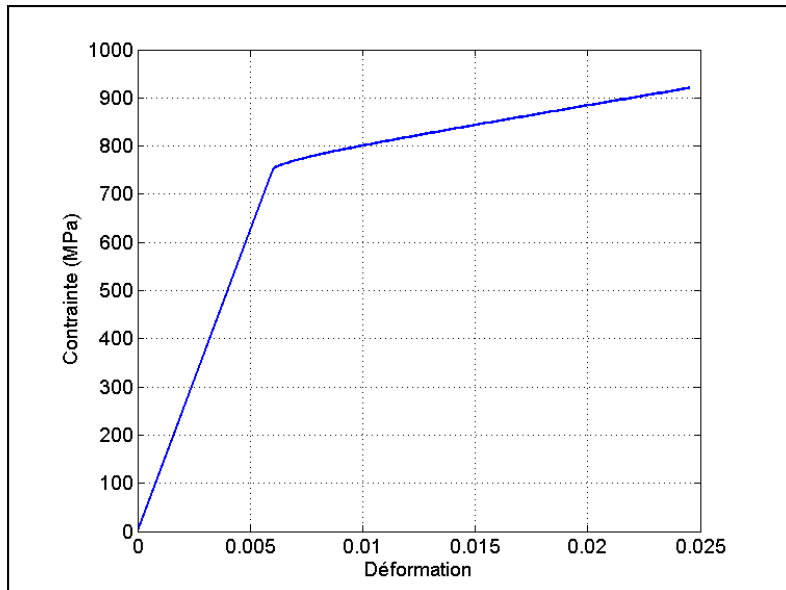


Figure 1 Comportement élastoplastique bilinéaire d'un AC homogène avec un incrément de chargement de 1 MPa

Étant donné que dans le modèle AC les équations différentielles de plasticité sont résolues par une approche explicite (Euler), la solution obtenue par ce modèle ne converge pas parfaitement vers la solution analytique. Ce problème peut être résolu en diminuant l'incrément de chargement. Le Tableau 2 montre la comparaison entre la solution analytique et les résultats d'AC pour différents incréments de chargement. On note que plus l'incrément de chargement diminue plus la réponse d'AC s'approche de la solution analytique.

Tableau 2 Comparaison la solution analytique d'une microstructure homogène avec la solution d'AC sous un chargement uniaxiale de 920 MPa

Incrément de chargement (MPa)	$\sigma_{11}$ (MPa)	$\epsilon_{33}$	$\epsilon_{11}$	$\epsilon_{33}^p$
<b>10</b>	26.7	0.0143	-0.0052	0.0076
<b>1</b>	5.8	0.0245	-0.0104	0.0173
<b>0.1</b>	0.58	0.0271	-0.0117	0.0197
<b>0.01</b>	0.058	0.0273	-0.0118	0.02
<b>Analytique</b>	0	0.0274	-0.0118	0.02

La Figure 3 illustre les courbes obtenues par l'AC homogène pour différents incréments de chargement.

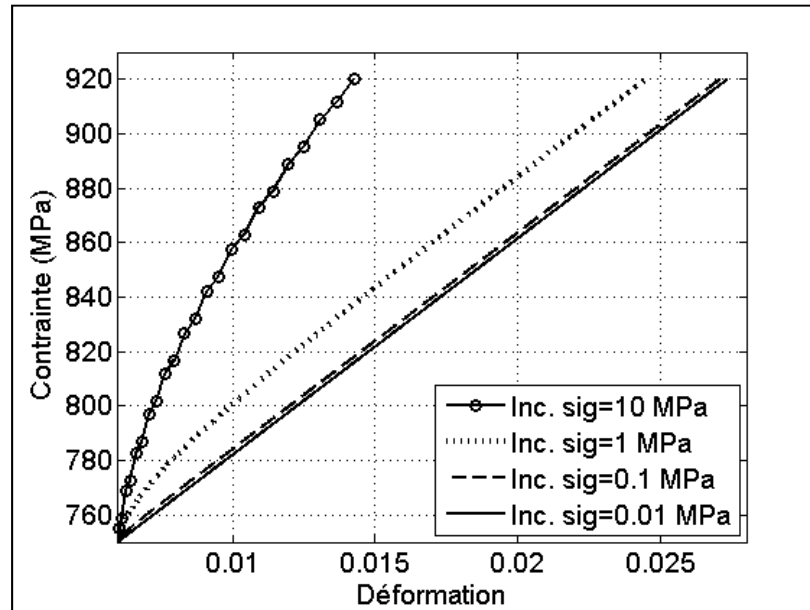


Figure 2 Comparaison du comportement élastoplastique d'un AC homogène pour différents incréments du chargement

## II) Comportement élastoplastique d'une microstructure hétérogène

Dans cette partie une microstructure hétérogène non texturée de 900 cellules est générée en AC. La matrice d'élasticité isotrope transversale de titane est utilisée pour calculer les propriétés élastiques de cette microstructure. Les détails de calculs des propriétés cristallographiques et géométriques des cellules sont présentés au chapitre 2. Un tenseur de contrainte avec une seule composante non nulle  $\sigma_{33} = 977,5 \text{ MPa}$  est imposé sur la microstructure. La réponse macroscopique de cette microstructure hétérogène est comparée avec la réponse obtenue par les ÉF. Cette comparaison permet de calibrer le module d'écrouissage pour le modèle AC ainsi que l'incrément de chargement. Le calcul par ÉF a été effectué avec un module d'écrouissage  $H=2500 \text{ MPa}$ .

La Figure 3 montre la comparaison entre la solution ÉF avec celle AC pour différents modules d'écroissage et un incrément de chargement de 1 MPa. On note qu'un module d'écroissage  $H=60\ 000$  MPa pour le modèle AC donne une réponse proche de celle obtenue avec l'approche ÉF. Donc on choisit ce module d'écroissage pour modéliser le comportement élastoplastique des microstructures hétérogènes dans cette étude.

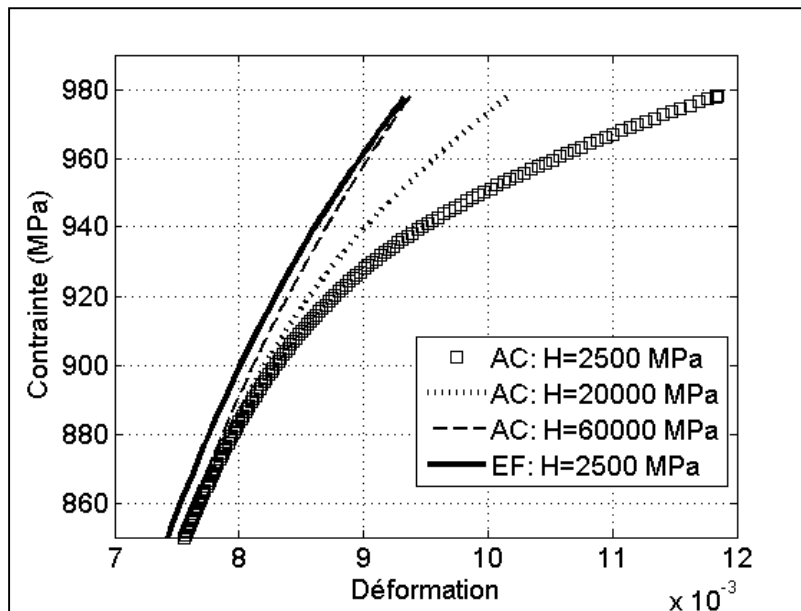


Figure 3 Comparaison du comportement élastoplastique macroscopique d'un AC hétérogène avec celui d'EF pour différents modules d'écroissage

Ici aussi, comme le cas d'une microstructure homogène, la solution d'AC dépend de l'incrément de chargement. Les réponses élastoplastiques AC pour différents incréments du chargement sont comparées avec la solution ÉF et sont illustrées dans la Figure 4. On note que la courbe obtenue pour un incrément de charge égal à 0,1 MPa est quasiment superposée sur la courbe obtenue pour un incrément de charge de 1 MPa. Donc, l'incrément de chargement de 1 MPa est utilisé pour effectuer des calculs sur des microstructures hétérogènes.

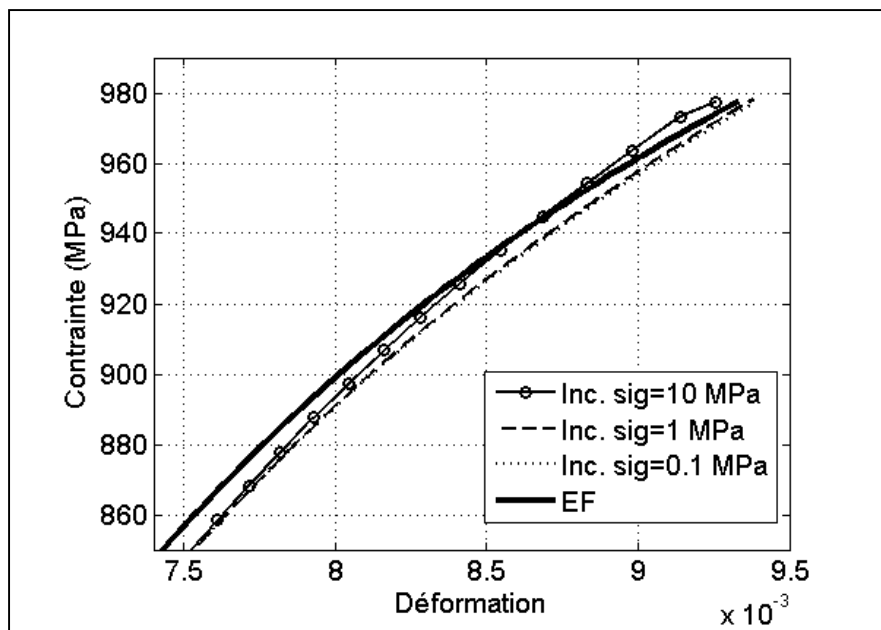


Figure 4 Comparaison du comportement élastoplastique d'un AC hétérogène avec ÉF pour différents incréments de chargement



### ANNEXE III

#### Matrice de Kearns

Dans cette étude, le voisinage d'une cellule est caractérisé par une matrice de Kearns. La matrice de Kearns est un critère géométrique pour mieux connaître la texture d'une microstructure et s'obtient comme :

$$\underline{\underline{K}} = \langle \vec{c} \otimes \vec{c} \rangle \quad (1)$$

Où  $\vec{c}$  est un vecteur qui s'obtient par la projection d'orientation sur l'axe de chargement comme :

$$\vec{c} = \begin{bmatrix} \sin \varphi_1 \sin \phi \\ -\cos \varphi_1 \sin \phi \\ \cos \phi \end{bmatrix} \quad (2)$$

Chaque composante de matrice de Kearns présente l'intensité de texture dans une direction et varie entre 0 et 1 respectivement pour une texture molle et dure. Pour une texture isotrope, les seules composantes non nulles de la matrice de Kearns sont les composantes diagonales et sont égales à 1/3. Dans cette étude, une matrice de Kearns est calculée pour chaque cellule en fonction de son orientation cristallographique et le voisinage d'une cellule est caractérisé par la moyenne des matrices de Kearns de ses 6 cellules. Puisque, la charge imposée est une traction uniaxiale dans la direction 3 du repère macroscopique, seulement la composante 33 de la matrice de Kearns appelée « facteur de Kearns »  $f_k$  est utilisée, étudier la texture. La Figure 5 montre un triangle standard avec les iso-facteurs de Kearns.

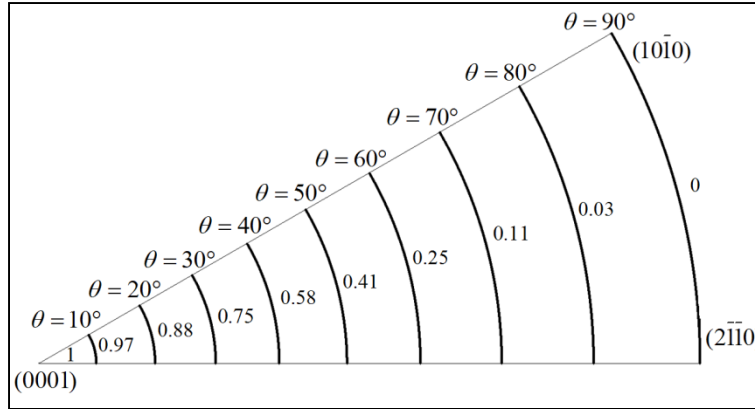


Figure 5 Iso-facteurs de Kearns

Une matrice de Kearns macroscopique est calculée pour dans l'AC pour caractériser la texture globale d'une microstructure. Cette matrice est calculée comme la moyenne arithmétique des matrices de Kearns de toutes les cellules et s'obtient comme :

$$\underline{\underline{K}}^{Macro} = \frac{1}{N^C} \sum_1^{N^C} \underline{\underline{K}}^C \quad (3)$$

Comme mentionné précédemment, pour une texture isotrope, les composantes diagonales de la matrice de Kearns macroscopique  $\underline{\underline{K}}^{Macro}$  seront égales à 1/3 et les composantes restantes sont nulles. Cependant, cela dépend fortement au nombre du tirage aléatoire d'orientations; plus le nombre d'orientations est élevé plus la matrice de Kearns converge vers une forme isotrope. La figure 6 montre la comparaison de facteur de Kearns macroscopique pour trois microstructures de 100, 400 et 900 orientations aléatoires et 1200 calculs. On constate que le facteur de Kearns est plus dispersé pour 100 orientations que pour 900. Le facteur de Kearns moyen de 1200 calculs converge plus rapidement vers 1/3 pour 900 orientations par rapport 400 et 100 orientations (Figure 7). Donc, dans le modèle AC des microstructures de 900 cellules avec des orientations aléatoires sont générées dont le facteur de Kearns macroscopique est proche à 1/3.



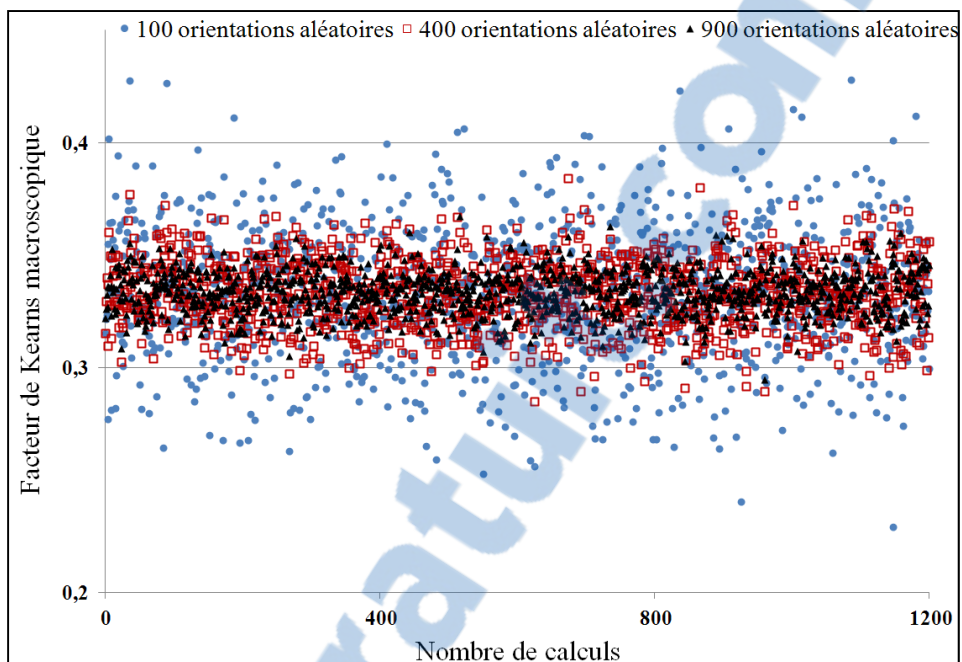


Figure 6 Comparaison de facteur de Kearns macroscopique pour différents nombres d'orientations et 1200 calculs

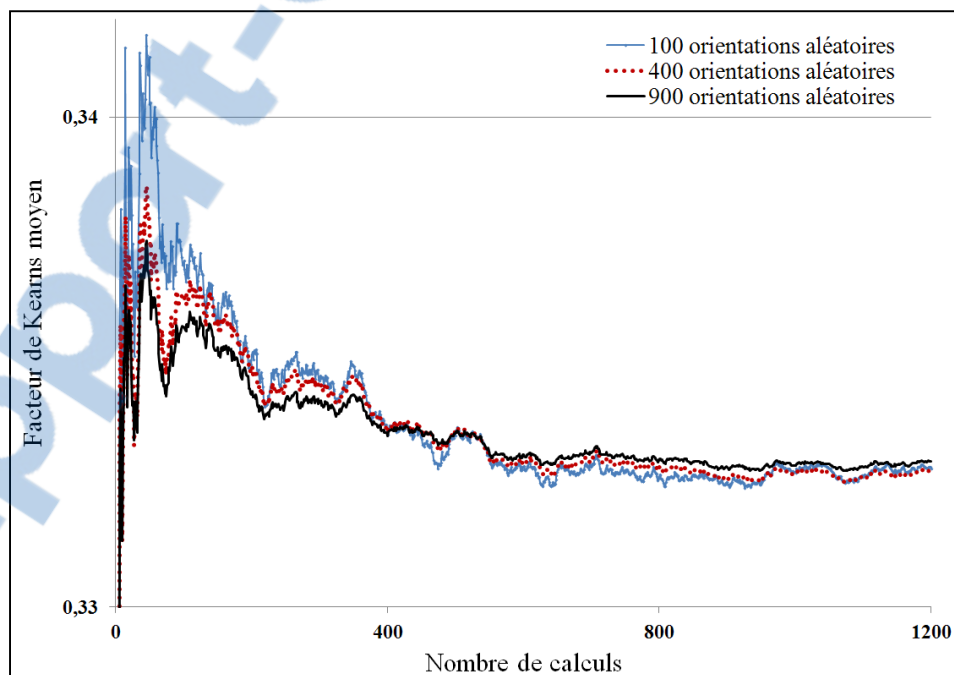


Figure 7 Convergence du facteur de Kearns moyen vers  $1/3$  pour différents nombres d'orientations et 1200 calculs



## BIBLIOGRAPHIE

- Anahid, M., Samal, M. K., Ghosh, S. 2011. « Dwell fatigue crack nucleation model based on crystal plasticity finite element simulations of polycrystalline titanium alloys ». *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 59, n° 10, p. 2157-2176.
- Bache, M. R. 2003a. « A review of dwell sensitive fatigue in titanium alloys: the role of microstructure, texture and operating conditions ». In *International Conference on Fatigue Damage of Structural Materials IV, 22-27 Sept. 2002*, 9-11. vol. 25, p. 1079-87. Coll. « Int. J. Fatigue (UK) ». UK: Elsevier.
- Bache, M. R., Bradshaw, C., Voice, W. 2003b. « Characterisation of foreign object damage and fatigue strength in titanium based aerofoil alloys ». *Materials Science & Engineering A (Structural Materials: Properties, Microstructure and Processing)*, vol. A354, IEE, p. 199-206.
- Bache, M. R., Cope, M., Davies, H. M., Evans, W. J., Harrison, G. 1997. « Dwell sensitive fatigue in a near alpha titanium alloy at ambient temperature ». In *International Conference on Fatigue Damage in Structural Materials, 22-27 Sept. 1996*, 1. vol. 19, p. 83-8. Coll. « Int. J. Fatigue (UK) ». UK: Elsevier.
- Balasubramanian, S., Anand, L. 2002. « Plasticity of initially textured hexagonal polycrystals at high homologous temperatures: application to titanium ». *Acta Materialia*, vol. 50, n° 1, p. 133-48.
- Barbe, F., Decker L., Jeulin D., Cailletaud G. 2001. « Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 1 : F. E. model ». *International Journal of Plasticity*. p. 513-536.
- Barbe, F., Quey R., Musienko A., Cailletaud G. 2009. « Three-dimensional characterization of strain localization bands in high-resolution elastoplastic polycrystals ». *Mechanics Research Communications*, vol. 36, n° 7, p. 762-768.
- Baxter, G. J., Rainforth, W. M., Grabowski, L. 1996. « TEM observations of fatigue damage accumulation at the surface of the near- titanium alloy IMI 834 ». *Acta Materialia*, vol. 44, n° 9, p. 3453-63.
- Baxter, S. C., Reynolds, A. P. 2004. « Modeling anisotropic hardening with a stochastic cellular automaton ». In *Fourth International Conference on Computational Stochastic, June 9, 2002 - June 13, 2002*, 1-2. vol. 19, p. 3-8. Coll. « Probabilistic Engineering Mechanics ». Corfu, Greece: Elsevier Ltd.
- Blenkinsop, P. A., Evans, W. J. Flower, H. M. 1996. *Titanium '95, science and technology* Coll. « Proceedings of the Eighth World Conference on Titanium held at the

International Convention Centre, Birmingham, UK, 22-26 October 1995 ». London, U.K.

Boutana, M. 2009. « Modelisation microstructurale en fatigue/fluage a froid des alliages de titane quasi alpha par le modele des automates cellulaires ». NR47626, Canada, Ecole de Technologie Superieure (Canada), 204 p.

Boyer, R. R. 1996. « An overview on the use of titanium in the aerospace industry ». In *5th International Symposium on Metallurgy and Technology of Titanium Alloys, 25-28 Sept. 1995*, 1-2. vol. 213, p. 103-14. Coll. « Mater. Sci. Eng. A, Struct. Mater., Prop. Microstruct. Process. (Switzerland) ». Switzerland: Elsevier.

Brandes, M. 2008. « Creep, fatigue, and deformation of alpha and alpha-beta titanium alloys at ambient temperature ». 3327343, United States, Ohio, The Ohio State University, 471 p.

Bridier, F. 2006. « Analyse expérimentale des modes de déformation et d'endommagement par fatigue à 20°C d'alliage de titane. Aspects cristallographiques à différentes échelles. ». France, École Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique, 291 p.

Bridier, F., P. Villechaise, J. Mendez., 2008. « Slip and fatigue crack formation processes in an / titanium alloy in relation to crystallographic texture on different scales ». *Acta Materialia*, vol. 56, The Institution of Engineering and Technology, p. 3951-62.

Bridier, F., P. Villechaise, J. Mendez, D. L. McDowell, . 2009. « Crystal plasticity modeling of slip activity in Ti-6Al-4V under high cycle fatigue loading ». *International Journal of Plasticity*, vol. 25, The Institution of Engineering and Technology, p. 1066-82.

Daehn, G. S. 2001. « Modeling thermally activated deformation with a variety of obstacles, and its application to creep transients ». *Acta Materialia*, vol. 49, p. 2017-2026.

Davies, H. M. 1997. « Low temperature dwell sensitive fatigue in near-alpha titanium alloys ». U. K., University College Swansea, 233 p.

Deka, D., Joseph, D. S., Ghosh, S., Mills., M. J. 2006. « Crystal plasticity modeling of deformation and creep in polycrystalline Ti-6242 ». *Metallurgical and Materials Transactions A (Physical Metallurgy and Materials Science)*, vol. 37A, n° 5, p. 1371-88.

Di Paola, F. 2010. « Modélisation multi-échelles du comportement thermo-mécanique de composites à particules sphériques ». Ecole Centrale des Arts et Manufactures Paris.

Diard, O., S. Leclercq, G. Rousselier et G. Cailletaud. 2005. « Evaluation of finite element based analysis of 3D multicrystalline aggregates plasticity. Application to crystal

- plasticity model identification and the study of stress and strain fields near grain boundaries ». *International Journal of Plasticity*, vol. 21, n° 4, p. 691-722.
- Ding, R., Guo, Z. 2002. « Microstructural modelling of dynamic recrystallisation using an extended cellular automaton approach ». *IUMRS Symposium on Multiscale Materials Modeling*, vol. 23, p. 209-18.
- Doquet, V., De Greef, V. 2012. « Dwell-fatigue of a titanium alloy at room temperature under uniaxial or biaxial tension ». *International Journal of Fatigue*, vol. 38, p. 118-29.
- Dunne, F. P. E., et D. Rugg. 2008. « On the mechanisms of fatigue facet nucleation in titanium alloys ». *Fatigue and Fracture of Engineering Materials and Structures*, vol. 31, p. 949-958.
- Dunne, F. P. E., Rugg, D., Walker, A. 2007. « Lengthscale-dependent, elastically anisotropic, physically-based hcp crystal plasticity: Application to cold-dwell fatigue in Ti alloys ». *International Journal of Plasticity*, vol. 23, The Institution of Engineering and Technology, p. 1061-83.
- Engler, O., Randle, V. 2010. *Introduction to texture analysis*. CRC press, U.S., 471 p.
- Eshelby, J. D. 1957. « The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems ». *Proceedings of the Royal Society of London 241 (1226)*, p. 376-396.
- Eunha, L. 2004. « Microstructure evolution and microstructure/mechanical properties relationship in alpha-beta titanium alloys ». Ohio State University, 229 p.
- Evans, W. J., Bache, M. R. 1994. « Dwell-sensitive fatigue under biaxial loads in the near-alpha titanium alloy IMI685 ». *International Journal of Fatigue*, vol. 16, IEE, p. 443-52.
- Feaugas, X., Clavel, M. 1997a. « Cyclic deformation behaviour of an / titanium alloy. I. Micromechanisms of plasticity under various loading paths ». *Acta Materialia*, vol. 45, n° 7, p. 2685-701.
- Feaugas, X., Pilvin, P., Clavel, M. 1997b. « Cyclic deformation behaviour of alpha-beta Ti alloy -II. Internal stresses and micromechanic modeling ». *Acta Materialia*, vol. 45, p. 2703-2714.
- Fisher, E. S., C. J. Renken. 1964. « Single-Crystal Elastic Moduli and the hcp → bcc Transformation in Ti, Zr, and Hf ». *Physical Review*, vol. 135, p. 482-494.

- François, D., Pineau, A., Zaoui, A. 1991. *Comportement mécanique des matériaux: Élasticité et plasticité*. Paris : Hermès science ; Lavoisier 528 p.
- Germain, L., Gey, N., Humbert, M., Bocher, P., et Jahazi, M. 2005. « Analysis of sharp microtexture heterogeneities in a bimodal IMI 834 billet ». *Acta Materialia*, vol. 53, IEE, p. 3535-43.
- Germain, L., Gey, N., Humbert, M., Vo, P., Jahazi, M., Bocher, P. 2008. « Texture heterogeneities induced by subtransus processing of near titanium alloys ». *Acta Materialia*, vol. 56, p. 4298-4308.
- Gilbert, E. N. 1962. « Random subdivision of space into crystals ». *Annals of Math. Statist.*, p. 958-972.
- Hasija, V., Ghosh, S., Mills, M. J., Joseph, D. S. 2003. « Deformation and creep modeling in polycrystalline Ti-6Al alloys ». *Acta Materialia*, vol. 51, IEE, p. 4533-49.
- Hutchinson, J. W. 1976. « Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials ». *Proc Roy Soc Lond A (Londre)*. p. 1001–127.
- Janssens, K. G. F. 2009. « An introductory review of cellular automata modeling of moving grain boundaries in polycrystalline materials ». *Mathematics and Computers in Simulation*, n° MATCOM-3186.
- Jha, S. K., Szczepanski, C. J., Golden, P. J., Porter, I. W. J., John, R. 2012. « Characterization of fatigue crack-initiation facets in relation to lifetime variability in Ti-6Al-4V ». *International Journal of Fatigue*, vol. 42, p. 248-257.
- Kocks, U. F., Tomé, C. N., Wenk, H. R. 1998. *Texture and Anisotropy*. Cambridge University Press, U.K, 676 p.
- Leyens, C., Peters, M. 2003. *Titanium and Titanium alloys fundamentals and applications*. Weinheim Wiley-VCH 532 p.
- Mayeur, J. R., McDowell, D. L. 2007. « A three-dimensional crystal plasticity model for duplex Ti-6Al-4V ». *International Journal of Plasticity*, vol. 23, n° 9, p. 1457-85.
- Miller, W. H. Jr., CHEN, R. T., Starke, E. A. Jr. 1987. « Microstructure, Creep, and Tensile Deformation in Ti-6Al-2Nb-1Ta-0.8Mo ». *Metallurgical Transactions A*. p. 1451-1568.
- Miodownik, M. A. 2002. « A review of microstructural computer models used to simulate grain growth and recrystallisation in aluminium alloys ». *Journal of Light Metals*, vol. 2, p. 125-135.

- Montheillet, F. 2004. « Comportement rhéologique des matériaux métalliques multiphasés ». *Techniques de l'ingénieur*, n° M 3 010.
- Montheillet, F., Gilormini, P. 1996. « Predicting the mechanical behavior of two-phase materials with cellular automata ». *International Journal of Plasticity*, vol. 12, p. 561-574.
- Moore, E. F. 1962. « Machine Models of Self-Reproduction ». *Proceedings of a Symposium on Applied Mathematics*, vol. 14, p. 187.
- Castro M. A. 2012. « Calculs EF d'agrégats de cristaux HCP en élastoviscoplasticité ». In *Société Française de Métallurgie et de Matériaux*. France.
- Mura, T. 1987. *Micromechanics of defects in solids*. Hingham, MA USA: Nijhoff Publishers.
- Naka, S., Lasalmonie, A., Costa, P., Kubin, L.P. 1988. « The low-temperature plastic deformation of  $\alpha$ -titanium and the core structure of a-type screw dislocations ». *Phil. Mag. A*. p. 717-740.
- Neal, D. F., Blenkinsop, P. A. 1976. « Internal fatigue origins in  $\alpha$ -titanium alloys ». *Acta Metallurgica*, vol. 24, IEE, p. 59-63.
- Neeraj, S. T. 2000. « Low temperature creep of titanium alloys: Microstructure, deformation mechanisms and modeling ». The Ohio State University, 320 p.
- Neumann, J. von 1963. *The general and logical theory of automata*. Collected Works, edited by A. H. Taub, 5, p. 288
- Odegard, B. C., Thompson, A. W. 1974. « Low temperature creep of Ti-6 Al-4 V ». *Metallurgical Transactions (USA)*. p. 1207-1213.
- Olsen, R. H., Moreen, H. A. 1971. « Calculation of the Elastic Anisotropy of Ti6Al4V Alloy Sheet From Pole Figure Data ». *Metallurgical Transactions* vol. 4, p. 701-705.
- Parenteau, T. 2009. « Modélisation micromécanique de composites thermoplastiques élastomères à matrice polypropylène ». Lorient (France), 174 p.
- Pilchak, A. L., et Williams, J. C. 2011. « Observations of facet formation in near-titanium and comments on the role of hydrogen ». *Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science*, vol. 42, n° 4, p. 1000-1027.
- Polmear, I. J. 1995. *Light alloys : metallurgy of the light metals*. New York ; Toronto : Halsted Press, 362 p.

- Priser, M. 2011. « Analyses multi-échelles du comportement en fluage d'alliages de zirconium ». Université de Bretagne-Sud.
- Craig P., Salageheh, N., Prasannavenkatesan R., McDowell, D. L. 2008. « Microstructure-sensitive modeling of high cycle fatigue ». In *Advances in Heterogeneous Material Mechanics 2008 - 2nd International Conference on Heterogeneous Material Mechanics, ICHMM 2008, June 3, 2008 - June 8, 2008*, p. 1193. Coll. « Advances in Heterogeneous Material Mechanics 2008 - Proceedings of the 2nd International Conference on Heterogeneous Material Mechanics, ICHMM 2008 ». Huangshan, China: DEStech Publications Inc.
- Quilici, S., G. Cailletaud. 1999. « FE simulation of macro-, meso- and micro-scales in polycrystalline plasticity ». *Eighth International Workshop on Computational Mechanics of Materials, 8-9 Oct. 1998*, vol. 16, p. 383-90.
- Roters, F., Eisenlohr, P., Hantcherli, L., Tjahjanto, D. D., Bieler, T. R., Raabe, D. 2010. « Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications ». *Acta Materialia*, vol. 58, n° 4, p. 1152-1211.
- El Yacoubi, S., Chopard, B., Bandini S. 2006. *Cellular Automata*. Germany: Springer, 735 p.
- Sackett, E. E., Germain, L., Bache, M. R. 2007. « Crystal plasticity, fatigue crack initiation and fatigue performance of advanced titanium alloys ». *International Journal of Fatigue*, vol. 29, The Institution of Engineering and Technology, p. 2015-21.
- Savage, F. M. 2000. « Microstructural and mechanic study of low temperature creep and dwell fatigue in single colony alpha beta ti alloys ». The Ohio state University, 338 p.
- Shen, W., Soboyejo, W. O., Soboyejo, A. B. O. 2004. « An investigation on fatigue and dwell-fatigue crack growth in Ti-6Al-2Sn-4Zr-2Mo-0.1Si ». *Mechanics of Materials*, vol. 36, IEE, p. 117-40.
- Singh, N., Gouthama, S., V. 2002. « Low cycle fatigue behavior of Ti alloy IMI 834 at room temperature ». *Materials Science & Engineering A (Structural Materials: Properties, Microstructure and Processing)*, vol. A325, IEE, p. 324-32.
- Sinha, V., Mills, M. J., Williams, J. C. 2004. « Understanding the contributions of normal-fatigue and static loading to the dwell fatigue in a near-alpha titanium alloy ». *Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science*, vol. 35 A, p. 3141-3148.
- Sinha, V., Mills, M. J., Williams, J. C. 2007. « Determination of crystallographic orientation of dwell-fatigue fracture facets in Ti-6242 alloy ». *Journal of Materials Science*, vol. 42, p. 8334-8341.



- Stroh, A. N. 1960. « A simple model of propagating crack ». *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 8, p. 119-122.
- Tan, X., Gu, H., Laird, C., Munroe, N. D. H. 1998a. « Cyclic deformation behavior of high-purity titanium single crystals. I. Orientation dependence of stress-strain response ». *Metallurgical and Materials Transactions A (Physical Metallurgy and Materials Science)*, vol. 29A, n° 2, p. 507-12.
- Tan, X., Guo, H., Gu, H., Laird, C., Munroe, N. D. H. 1998b. « Cyclic deformation behavior of high-purity titanium single crystals. II. Microstructure and mechanism ». *Metallurgical and Materials Transactions A (Physical Metallurgy and Materials Science)*, vol. 29A, n° 2, p. 513-18.
- Toubal, L., Bocher, P., Moreau, A. 2009. « Dwell-fatigue life dispersion of a near alpha titanium alloy ». *International Journal of Fatigue*, vol. 31, The Institution of Engineering and Technology, p. 601-5.
- Tromans, D. 2011. « Elastic anisotropy of HCP metal crystals and polycrystals ». *International Journal of Research and Reviews in Applied Sciences*, vol. 16, p. 462-483.
- Uta, E. 2009. « Etude des hétérogénéités de texture et de microstructure au sein de disques forgés en IMI834 : Influence sur les propriétés en fatigue-dwell ». l'Université de Metz, 247 p.
- Vichniac, G. Y. 1984. « Simulating physics with cellular automata ». In *Proceedings of an Interdisciplinary Workshop on Cellular Automata, 7-11 March 1983*, 1-2. vol. 10D, p. 96-116. Coll. « Physica D (Netherlands) ». Netherlands.
- Voigt, W. 1928. *Lehrbuch Der Kristallphysik*. B.G. Teubner, Leipzig, Germany.
- Miller, W. H., Chen, R. T., Starke, E. A. 1987. « Microstructure, Creep, and Tensile Deformation in Ti-6Al-2Nb-1Ta-0.8Mo ». *Metall. Trans.*, p. 1451.
- Walpole, L. J. 1969. « On the overall elastic moduli of composite materials ». *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 17, p. 235-251.
- Wang, X., Vo, P., Jahazi, M., Yue, S. 2007. « Dwell fatigue microstructure in a near-Titanium Alloy ». In, 4. vol. 38, p. 831-839. Coll. « *Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science* ». 101 Philip Drive, Assinippi Park, Norwell, MA 02061, United States: Springer Boston.
- Whittaker, M. T., Evans, W. J., Harrison, W. 2009. « Time Dependent Fatigue Fractures of Titanium Alloys ». n° 12th. International Conference on Fracture

- Williams, J. C., Baggerly, R. G., Paton, N. E. 2002. « Deformation behavior of HCP Ti-Al alloy single crystals ». In *International Symposium Defect Properties and Mechanical Behaviour of H.C.P. Metals and Alloys', 12-15 Feb. 2001*, 3A. Vol. 33A, p. 837-50. Coll. « Metall. Mater. Trans. A, Phys. Metall. Mater. Sci. (USA) ». USA: Minerals, Metals & Mater. Soc. & ASM Int.
- Yazdipour, N., Davies, C. H. J., Hodgson, P. D. 2008. « Microstructural modeling of dynamic recrystallization using irregular cellular automata ». *Computational Materials Science*, vol. 44, p. 566-576.
- Zakharchenko, I. G., Bryukhanov, A. E. 1968. « Anisotropy of Young's modulus in cold-rolled titanium ». *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii, Fizika*, IEE, p. 24-9.
- Zhan X., Wei Y., Dong Z. 2008. « Cellular automaton simulation of grain growth with different orientation angles during solidification process ». *Journal of Materials Processing Technology*, vol. 208, p. 1-8.
- Zhang, M., Zhang J., McDowell D. L. 2007. « Microstructure-based crystal plasticity modeling of cyclic deformation of Ti-6Al-4V ». *International Journal of Plasticity*, vol. 23, p. 1328-1348.