Simulation numérique multi-échelles du comportement mécanique des alliages de titane bêta-métastable Ti5553 et Ti17

Guillaume Martin

▶ **To cite this version:**

Guillaume Martin. Simulation numérique multi-échelles du comportement mécanique des alliages de titane bêta-métastable Ti5553 et Ti17. Autre. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2012. Français. NNT : 2012ENMP0099 . pastel-00873129

HAL Id: pastel-00873129
https://pastel.hal.science/pastel-00873129

Submitted on 15 Oct 2013

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

ParisTech
INSTITUT DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES
PARIS INSTITUTE OF TECHNOLOGY

MINES ParisTech

École doctorale n°432 : Sciences des Métiers de l'Ingénieur

Doctorat ParisTech

T H È S E

pour obtenir le grade de docteur délivré par

l'École nationale supérieure des Mines de Paris

Spécialité « Sciences et génie des matériaux »

présentée publiquement par

Guillaume MARTIN

le 10 Décembre 2012

Simulation numérique multi-échelles du comportement mécanique des alliages de titane bêta-métastable Ti5553 et Ti17

Numerical multiscale simulation of the mechanical behavior of beta-metastable titanium alloys Ti5553 and Ti17

Directeur de thèse : Georges CAILLETAUD
Co-encadrements de thèse : Loïc NAZÉ et Éveline HERVÉ-LUANCO

M. Issam DOGHRI,	Professeur, Université Catholique de Louvain	Rapporteur
M. Jean RAPHANEL,	Directeur de recherche, École Polytechnique	Rapporteur
Mme Élisabeth AEBY-GAUTIER,	Directeur de recherche, Institut Jean Lamour	Examinateur
M. David PIOT,	Chargé de recherche, Mines Saint-Etienne	Examinateur
M. Patrick VILLECHAISE,	Directeur de recherche, Institut P'	Examinateur
Mme Éveline HERVÉ-LUANCO,	Professeur, Université de Versailles	Examinateur
M. Loïc NAZÉ,	Maître assistant, Mines PARISTECH	Examinateur
M. Georges CAILLETAUD,	Professeur, Mines PARISTECH	Examinateur
M. Jean-Yves GUÉDOU,	Adjoint au Chef de Division Qualité et Procédés SNECMA	Invité

MINES ParisTech
Centre des Matériaux, UMR CNRS 7633
BP 87 - 91003 EVRY Cedex, France

T H È S E

There is a fine line between wrong and visionary.
Unfortunately, you have to be a visionary to see it.

Sheldon, The Big Bang Theory

/home/zebulon/Z8.5/bin/Zrun : line 653 : 7538 Erreur de segmentation $TIMEIT $EXE $ARG $FILE

Remerciements

Ce travail a été réalisé au Centre des Matériaux des mines PARISTECH avec le soutien de l'entreprise SNECMA du groupe SAFRAN. Cette thèse fait partie du projet PROMITI qui s'interesse aux microstructures et propriétés mécaniques des alliages de titane β-métastables, et qui est financé par la Fédération de Recherche de l'Aéronautique et de l'Espace.
Je tiens à remercier tous les participants au projet, pour leur soutien et pour les réflexions constructives qui ont été menées vis-à-vis de mon travail lors des points d'avancement. Je remercie plus particulièrement Elisabeth Gautier, qui a su admirablement encadrer ce projet PROMITI, et qui a également participé à mon jury de thèse, tout comme Patrick Villechaise que je remercie également.
Un petit clin d'oeil à Benoît Appolaire, autre membre de PROMITI, qui a été un de mes professeurs à l'EEIGM, puis mon encadrant de stage de fin d'étude, et qui n'est jamais bien loin.

Je remercie les autres thèsards de PROMITI : Amico Settefrati, Nicolas Escalé et Timothée Duval, pour cette fructueuse collaboration. J'éspère que nos chemins professionnels se croiseront à nouveau (en tant qu'encadrants de thèse dans un PROMITI 2 ?).

J'aimerais également remercier mes deux rapporteurs, Jean Raphanel et Issam Doghri, ainsi que David Piot qui a été examinateur dans mon jury de thèse, pour leurs analyses pertinentes at approfondies de mon travail. Je remercie Adeline Bénéteau et Marion Derrien qui m'ont encadré du coté Snecma, et Jean-Yves Guédou pour sa présence dans mon jury de thèse.

Un grand merci à Eveline Hervé et Loïc Nazé, qui m'ont encadré de manière certes épisodique, mais qui se sont montrés d'une grande aide le moment venu sur des sujets très spécifiques. Je remercie mon directeur de thèse, Georges Cailletaud, d'abord pour m'avoir initié aux grands vins suisses (...), mais aussi pour la grande confiance qu'il m'a accordé et pour tous ses bons conseils.

J'exprime ma gratitude à toutes les personnes du CDM avec qui j'ai eu l'occasion de collaborer. Je pense notamment à Vladislav Yastrebov, Nicolaï Osipov et Djamel Missoum pour les problèmes d'ordre Zébulonesque, à Franck Nguyen, qui m'a été d'une grande aide pour la génération de maillage 2D (à quand le 3D ?), et enfin à Konstantin Kuzmenkov et Kacem Saï avec qui j'ai beaucoup apprécié de travailler. Je salue également toute l'équipe de foot du CDM, les matchs du mercredi me manqueront...

Dédicace spéciale au bureau A005, à Anthony Marais, Prajwal Sabnis, Julian Durand, Rémi Martinez et Michael Fischlschweiger. Travailler dans une bonne ambiance avec des gens qui sont toujours prêts à vous aider, c'est une chance, mais quand ça devient des amis, c'est encore mieux !

Enfin mes derniers remerciements vont à tous mes proches qui sont venus lors de ma soutenance pour m'encourager, à ma famille, à mes parents, qui m'ont toujours poussé à donner le meilleur de moi-même, et à ma compagne, qui m'a soutenu durant ces trois années.

Table des matières

Introduction **1**

1 Observations et caractérisations expérimentales des alliages de titane β-métastable **5**
1.1 Généralités sur les alliages de titane . . . 5
1.1.1 Structures cristallines du titane . . . 5
1.1.2 Classification des alliages de titane . . . 7
1.2 Mécanismes de déformation dans les alliages de titane . . . 9
1.2.1 Elasticité . . . 9
1.2.2 Plasticité . . . 9
1.2.3 Systèmes de glissement dans la phase α . . . 10
1.2.4 Systèmes de glissement dans la phase β . . . 12
1.2.5 Désorientation entre les phases α et β . . . 13
1.3 Microstructures . . . 14
1.3.1 Séquences de précipitation $\beta \rightarrow \alpha$ . . . 14
1.3.2 Influence des traitements thermomécaniques . . . 17
1.3.3 Présentation des microstructures du Ti17 . . . 19
1.3.4 Présentation des microstructures du Ti5553 . . . 22
1.4 Relations entre propriétés mécaniques et microstructures . . . 24
1.5 Observations expérimentales multi-échelles de la déformation plastique . . . 26
1.5.1 Echelle microscopique . . . 26
1.5.2 Echelle du grain β transformé . . . 27
1.6 Conclusions partielles . . . 30

2 Comportement mécanique et homogénéisation des matériaux hétérogènes **31**
2.1 Elasticité . . . 31
2.1.1 Forme générale de l'élasticité linéaire . . . 31
2.1.2 Décomposition d'un tenseur d'élasticité isotrope . . . 32
2.1.3 Décomposition d'un tenseur d'élasticité cubique . . . 33
2.2 Plasticité macroscopique . . . 34
2.2.1 Présentation générale . . . 34
2.2.2 Ecrouissage et fonction de charge . . . 35
2.2.3 Ecoulement plastique . . . 36
2.2.4 Ecoulement viscoplastique . . . 37
2.3 Plasticité cristalline . . . 38
2.3.1 Ecrouissage et fonction de charge . . . 38
2.3.2 Ecoulement plastique . . . 39
2.3.3 Ecoulement viscoplastique . . . 40
2.4 Composantes de la matrice jacobienne . . . 40

2.4.1 Critère de von Mises . . . 41
2.4.2 Critère de plasticité cristalline . . . 42
2.5 Lois de transition d'échelles . . . 44
2.5.1 Premiers travaux . . . 44
2.5.2 Schéma auto-cohérent de Hill en élasto-plasticité . . . 46
2.5.3 Approximations du schéma auto-cohérent de Hill . . . 48
2.5.4 Modèles basés sur la règle en β . . . 49
2.5.5 Schémas auto-cohérents en élasto-viscoplasticité . . . 50
2.6 Conclusions partielles . . . 55

3 Homogénéisation du comportement élasto-viscoplastique des alliages de titane β-métastable à température ambiante 57
3.1 Simulation du comportement mécanique des microstructures industrielles de Ti5553 et de Ti17 à partir de modèles à champs moyens . . . 57
3.1.1 Stratégie d'identification . . . 57
3.1.2 Comportement élastique de la phase β . . . 58
3.1.3 Comportement viscoplastique de la phase β . . . 62
3.1.4 Stratégie de modélisation du comportement α/β . . . 68
3.1.5 Comportement élastique de la phase α . . . 70
3.1.6 Comportement viscoplastique α/β . . . 73
3.2 Relations microstructure – propriétés mécaniques . . . 94
3.2.1 Dépendance du seuil de plasticité et de l'écrouissage en fonction de la microstructure . . . 94
3.2.2 Application au modèle des champs translatés en plasticité de von Mises 96
3.2.3 Application au modèle de Sabar et al. en plasticité anisotrope . . . 101
3.3 Discussion . . . 111
3.4 Conclusions partielles . . . 116

4 Homogénéisation locale du grain β transformé, couplage avec les éléments finis 117
4.1 Présentation de l'étude numérique . . . 117
4.1.1 Description de l'expérience et de son adaptation dans un calcul EF . 117
4.1.2 Homogénéisation des ex-grains β . . . 121
4.2 Résultats du calcul EF . . . 124
4.2.1 Champs de déformation . . . 124
4.2.2 Champ de déplacement hors-plan . . . 127
4.3 Discussion . . . 129
4.4 Conclusions partielles . . . 134

Conclusion générale et perspectives 135

A Notations utilisées dans le manuscrit 145
A.1 Abréviations . . . 145
A.2 Vecteurs, tenseurs, matrices, ... 146
A.3 Opérateurs . . . 146

B Etude des microstructures du Ti17 et du Ti5553 : courbes de traction expérimentales et simulées 147
B.1 Alliage Ti17 . . . 147
B.2 Alliage Ti5553 . . . 156

C Méthodes numériques d'intégration des équations différentielles **167**
C.1 Méthode de Runge-Kutta 167
C.2 θ-méthodes 168

D Problème de l'inclusion dans un milieu homogène infini **169**

E Détermination du tenseur d'élasticité et du tenseur d'Eshelby **171**
E.1 Relations entre constantes élastiques pour un matériau isotrope. 171
E.2 Calcul numérique du tenseur d'Eshelby : Exemples 172
E.2.1 Inclusion sphérique dans un milieu isotrope 172
E.2.2 Disque ($a_3 \to 0$) dans un milieu orthotrope 172
E.2.3 Cylindre infini ($\rho = \frac{a_1}{a_2} = 0.4,\ \ a_3 \to \infty$) dans un milieu isotrope transverse 173
E.3 Tenseur d'Eshelby dans le cas d'une inclusion aplatie ($a_3 << a_2 < a_1$) dans un HEM isotrope [Mura, 1987] 174

F Calcul des déformations plastiques lors d'un traitement thermique **175**
F.1 Présentation du problème 175
F.2 Evolution des propriétés mécaniques de la phase α avec la température . . . 176
F.2.1 Elasticité 176
F.2.2 Viscoplasticité 177
F.3 Evaluation des contraintes liées à la dilatation thermique de la phase α . . . 179
F.4 Calcul des coefficients de dilatation de la phase α 180

Introduction

La Manacannite, comme on l'appelait à la fin du 18^e siècle, avant que les Titans grecs ne décident de renommer cet élément métallique à leur image[1], possède une bonne résistance à la corrosion et des propriétés spécifiques élevées. La densité du titane pur est en effet 40% plus faible que celle des aciers au carbone par exemple. Bien que le titane reste une ressource relativement abondante sur Terre, son coût reste élevé (11$/kg en 2011 pour l'éponge de titane de qualité aéronautique). Ceci est dû principalement au fait que l'extraction de l'éponge de titane reste un processus complexe, et que les méthodes employées n'ont guère évolué : le procédé Kroll, inventé dans les années 30 et très consommateur en énergie, demeure à ce jour la principale méthode pour obtenir du titane. Ces dernières années, la Chine est devenue le leader incontesté de la production d'éponges de titane, à l'exception des éponges de qualité supérieure qui sont encore produites en majorité au Japon, en Europe et aux Etats-Unis. L'enjeu majeur des prochaines années, pour des questions écologiques mais surtout financières, est le recyclage du "scrap", c'est-à-dire des déchets industriels de titane, pour lesquels de nouvelles méthodes ont récemment émergé.

Dans les applications industrielles, on retrouve généralement le titane sous forme d'alliages. L'addition d'éléments d'alliage permet d'accroître considérablement les propriétés mécaniques et la tenue à haute température. Mais ceux-ci présentent également l'inconvénient d'être très lourds et très chers (on pense notamment au Vanadium qui est présent dans la plupart des alliages de titane β-métastable). Pour ces raisons les alliages de titane sont plus chers et ont une masse volumique plus élevée que le titane pur.

La bonne résistance à la corrosion des alliages de titane en fait de bons candidats pour des applications industrielles dans les secteurs de l'énergie et de la chimie. A l'heure actuelle, une importante quantité de titane est ainsi utilisée pour la construction d'usines de dessalement dans la péninsule arabe.

L'industrie aéronautique est également un consommateur important d'alliages de titane, la demande ayant même augmenté de 10% pour atteindre près de 44 000 tonnes pour l'année 2011[2]. Dans ce secteur, des efforts considérables sont faits pour alléger les structures et, par conséquent, limiter la consommation en carburant. Les avionneurs cherchent donc à utiliser des matériaux qui combinent hautes performances mécaniques et légèreté accrue. Les matériaux composites constituent le symbole incontournable de cette révolution technologique. Ainsi, le Dreamliner 787 de Boeing et le A350 XWB d'Airbus intègrent environ 50% de matériaux composites avec, notamment, un fuselage conçu intégralement en composite à matrice organique et fibres de carbone. Ils prévoient ainsi une diminution de 20% en poids par rapport à une structure classique en alliage d'aluminium.

1. Ne pas prendre cette information à la légère !
2. Information tirée du site web de l'Associaton Française du Titane, http ://www.titane.asso.fr/

Pour les pièces soumises à des températures et des contraintes élevées, comme par exemple dans les moteurs ou les trains d'atterrissage, l'utilisation des alliages métalliques est encore privilégiée. Les alliages de titane y sont utilisés pour leur légèreté, ainsi que pour leurs bonnes caractéristiques mécaniques et leur résistance à l'endommagement, qu'ils parviennent à conserver pour des températures assez élevées. Dans ce contexte, les alliages de titane β-métastable apparaissent sous un jour favorable : ils peuvent être amenés à remplacer les aciers, ainsi que d'autres alliages de titane, tels que le TA6V, dans des composants du moteur (disques et aubes des compresseurs de turbo-machines) ou bien dans les trains d'atterrissage par exemple. Ils se distinguent des autres alliages de titane par leur facilité de mise en forme et leur excellente résistance mécanique.

L'optimisation continue des traitements thermomécaniques par les différents acteurs du processus de fabrication des pièces forgées titane, a permis d'obtenir des microstructures qui, par la morphologie et la composition chimique des phases en présence, donnent des propriétés mécaniques et physiques stables et d'une grande efficacité dans leurs conditions d'utilisation. Ces travaux ont été menés essentiellement sur les alliages de titane historiques dans l'aéronautique, notamment le TA6V. Pour les alliages de titane β-métastable, les études restent peu nombreuses : on en retrouve en Belgique [Gerday, 2009] [Clément, 2010], au Canada [Welk, 2010], ainsi qu'au Royaume-Uni [Jones *et al.*, 2009a] [Jones *et al.*, 2009c] [Jones *et al.*, 2009b] pour le Ti5553. Concernant l'alliage Ti17, qui est utilisé depuis plus longtemps dans l'industrie, les études françaises les plus récentes sont [Gourbesville, 2000], [Delfosse, 2005] et [Da Costa Teixeira, 2005].

Ce travail de thèse est donc mené dans la continuité de ces recherches. Il s'inscrit plus particulièrement dans un projet français, le projet PROMITI, qui s'articule autour de quatre centres de recherches (Laboratoire de Mécanique et de Physique des Matériaux – P', Centre des Matériaux – Mines ParisTech, Laboratoire de Science et Ingénierie des Matériaux et Métallurgie – IJL, et le Centre d'Elaboration des Matériaux et d'Etudes Structurales) et de cinq partenaires industriels européens (Airbus France et EADS Innovation Works France – EADS, Aubert et Duval – ERAMET, Snecma et Messier-Bugatti-Dowty –SAFRAN). Il s'agit d'un programme de recherche soutenu par la Fondation de Recherche pour l'Aéronautique et l'Espace (FRAE), qui a pour objectif d'étudier les approches multi-échelles des propriétés et des microstructures des alliages de titane β-métastable.

Chaque laboratoire de recherche a mené, par des approches différentes mais complémentaires, des travaux de thèse sur le Ti17 et le Ti5553. Dans le cadre de la thèse présentée ici, le but était de développer plusieurs types de modèles, à plusieurs échelles, en se basant sur les résultats expérimentaux de nos partenaires : les modèles les plus complexes, centrés sur la microstructure, étant destinés aux interprétations métallurgiques, et les plus simples aux bureaux d'études, dans le cadre industriel. Ces modèles, basés sur des méthodes d'homogénéisation en champs moyens, permettent d'obtenir des informations locales pouvant aider à l'interprétation des mécanismes de déformation par les métallurgistes. Ils offrent également la possibilité, à partir d'une analyse avancée des relations existantes entre microstructures et propriétés mécaniques, d'aider au choix des microstructures en donnant des indications sur le comportement mécanique de chacune d'entre elles.

Le manuscrit, qui rassemble nos réflexions scientifiques sur ce sujet et les modèles numériques sur lesquels nous nous sommes appuyés, se divisera en quatre parties.

Le chapitre 1 permettra de présenter l'ensemble des connaissances acquises sur les alliages de titane β-métastable, et en particulier sur le Ti17 et le Ti5553. C'est sur cette base expérimentale, principalement alimentée par les collaborateurs de PROMITI, que s'appuieront nos modèles.

Le chapitre 2 propose une revue détaillée des modèles à champs moyens. Ce type de modèle, que nous privilégierons pour prédire le comportement mécanique des alliages de titane β-métastable, est basé sur des techniques d'homogénéisation, permettant de calculer la réponse effective d'un matériau hétérogène à partir du comportement particulier des entités qui le composent.

Dans le chapitre 3, les informations tirées des deux chapitres précédents seront mises à contribution dans le but d'obtenir des modèles capables de prédire le comportement des alliages de titane β-métastable à température ambiante. Des modèles multi-échelles complexes seront développés afin de représenter le comportement mécanique des microstructures industrielles du Ti17 Snecma et du Ti5553 Messier-Bugatti-Dowty. D'autres modèles, moins sophistiqués, seront mis en place pour permettre de simuler le comportement des alliages de titane β-métastable en fonction de leur microstructure.

Dans le chapitre 4, un intérêt tout particulier sera porté à l'échelle des ex-grains β, et sur la relation existant entre cette dernière et la déformation. Au travers de travaux menés en collaboration avec T. Duval (institut P'), une analyse des mécanismes de déformation à cette échelle sera proposée, rassemblant des résultats expérimentaux et des simulations numériques.

Le manuscrit se terminera par une synthèse des moyens numériques qui ont été mis en place dans le cadre de cette thèse, et conclura sur les résultats obtenus jusqu'ici. Des perspectives seront données afin de définir d'une part ce qui doit être amélioré, et d'autre part ce qui aurait le mérite d'être développé par la suite, pour aller plus loin sur ce sujet, en l'étendant à d'autres aspects non traités ici.

Chapitre 1

Observations et caractérisations expérimentales des alliages de titane β-métastable

1.1 Généralités sur les alliages de titane

1.1.1 Structures cristallines du titane

Le titane pur subit une transformation allotropique à 882°C , passant d'une structure cristalline de type cubique centrée, la phase β stable à haute température, à une structure hexagonale compacte ($c/a = 1.587$), la phase α stable à température inférieure à 882°C (Fig.1.1). On appelle généralement transus β (T_β), la température de transformation d'une phase à l'autre. Il est à noter qu'une troisième structure cristalline, de type orthorhombique, peut apparaître dans les alliages de titane. Cette structure, que l'on retrouve dans la phase α", sera mentionnée par la suite.

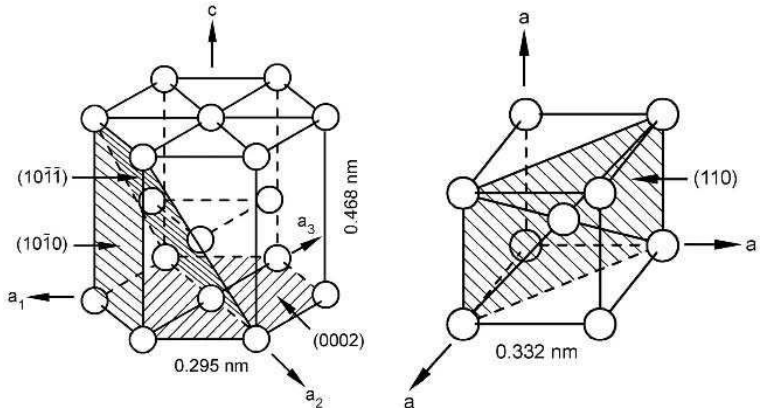


FIGURE 1.1 – Représentation cristallographique du prisme hexagonal compact de la phase α, à gauche, et de la maille cubique centrée de la phase β, à droite, [Lütjering et Williams, 2007].

La précipitation de la phase α dans un ex-grain β lors du refroidissement se fait en accord avec les relations de Burgers [Burgers, 1934] :

$$(110)_\beta // (0001)_\alpha \text{ et } [1\bar{1}1]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$$

Il s'agit de la coïncidence d'un plan $\{110\}_\beta$ du réseau cubique avec un plan basal $(0001)_\alpha$ du réseau hexagonal, ainsi que des directions $[1\bar{1}1]_\beta$ et $[11\bar{2}0]_\alpha$ (Fig.1.2). Ainsi, à partir de l'orientation cristalline d'un ex-grain β, la phase α va pouvoir apparaître sous douze configurations cristallines différentes (Tab.1.1), qu'on appelle plus généralement variants.

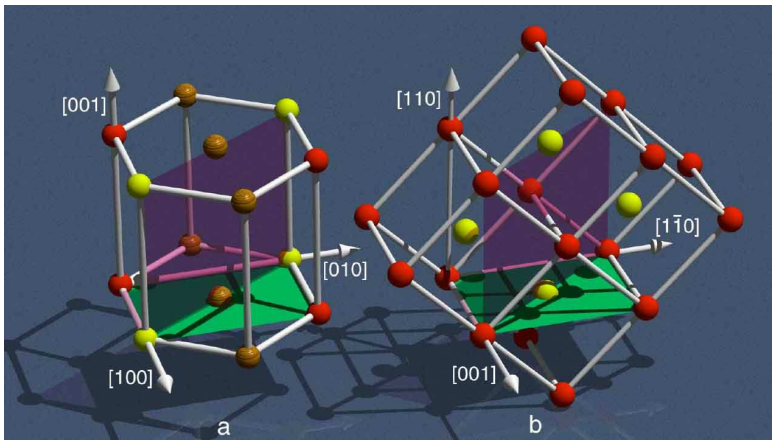


FIGURE 1.2 – Relations de Burgers entre la phase α *hcp* et la phase β *bcc* pour un variant donné.

Il est utile pour la suite de définir une base orthonormée dans la structure hexagonale (Fig.1.3) : la représentation qui utilise quatre vecteurs unitaires (a_1, a_2, a_3, c) est transformée en une base "ortho-hexagonale" (a'_1, a'_2, c).

$$a'_1 = a_1$$
$$a'_2 = \frac{(a_2 - a_3)}{\sqrt{3}}$$

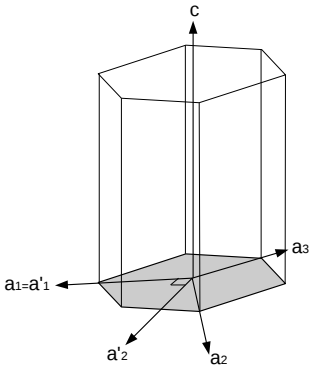


FIGURE 1.3 – Passage de la base hexagonale (a_1, a_2, a_3, c) à la base orthonormée (a'_1, a'_2, c).

Le passage du repère orthonormé de la matrice β à celui du variant α peut s'opérer en appliquant successivement trois rotations définies par leurs angles d'Euler (Tab.1.1).

Variants	Relations d'épitaxie		Angles d'Euler		
	Plan	Direction	φ_1 ($\circlearrowleft \underline{z}$)	Φ ($\circlearrowleft \underline{A}$)	φ_2 ($\circlearrowleft \underline{Z}$)
1	$(110)_\beta // (0001)_\alpha$	$[1\bar{1}1]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	-45°	-90°	-90°
2	$(110)_\beta // (0001)_\alpha$	$[\bar{1}11]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	-45°	90°	90°
3	$(1\bar{1}0)_\beta // (0001)_\alpha$	$[\bar{1}\bar{1}1]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	45°	90°	90°
4	$(1\bar{1}0)_\beta // (0001)_\alpha$	$[111]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	45°	-90°	-90°
5	$(101)_\beta // (0001)_\alpha$	$[\bar{1}\bar{1}1]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	-90°	135°	0°
6	$(101)_\beta // (0001)_\alpha$	$[\bar{1}11]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	90°	45°	0°
7	$(\bar{1}01)_\beta // (0001)_\alpha$	$[1\bar{1}1]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	-90°	45°	0°
8	$(\bar{1}01)_\beta // (0001)_\alpha$	$[111]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	90°	135°	0°
9	$(011)_\beta // (0001)_\alpha$	$[1\bar{1}1]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	0°	135°	0°
10	$(011)_\beta // (0001)_\alpha$	$[\bar{1}\bar{1}1]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	180°	45°	0°
11	$(0\bar{1}1)_\beta // (0001)_\alpha$	$[111]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	0°	45°	0°
12	$(0\bar{1}1)_\beta // (0001)_\alpha$	$[\bar{1}11]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	0°	-135°	180°

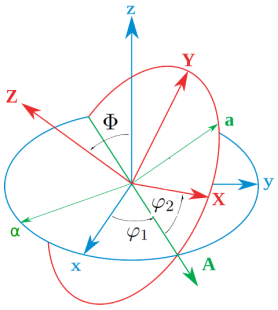


TABLE 1.1 – Relations de Burgers entre le réseau cristallin de la phase α et celui de la phase β, et angles d'Euler permettant le passage de la base orthonormée de la phase β à celle de la phase α.

1.1.2 Classification des alliages de titane

Les alliages de titane sont généralement biphasés à température ambiante. La phase β résiduelle est alors stabilisée par la présence des éléments d'addition bêtagènes (Mo, V, Cr, Fe, Cu, Ni, ...). On peut ainsi obtenir des alliages de titane avec une fraction de phase β élevée, comme les β-métastable. Les éléments alphagènes (Al, Sn, Zr, O, ...), au contraire, stabilisent la phase α à haute température, augmentant ainsi la température de transus β.

Des équivalences sont généralement utilisées pour caractériser les alliages en fonction de leurs éléments d'alliages :

$$Al_{eq}(\%mass) = [Al] + \frac{[Sn]}{3} + \frac{[Zr]}{6} + 10\ [O_2]$$

$$Mo_{eq}(\%mass) = [Mo] + \frac{[V]}{1.5} + \frac{[Cr]}{0.6} + \frac{[Fe]}{0.35} + \frac{[Cu]}{1.3} + \frac{[Ni]}{3.6}$$

Il est alors d'usage de classer les alliages de titane suivant plusieurs catégories, en fonction de leur proportion de phase α et β à température ambiante (Fig.1.4).

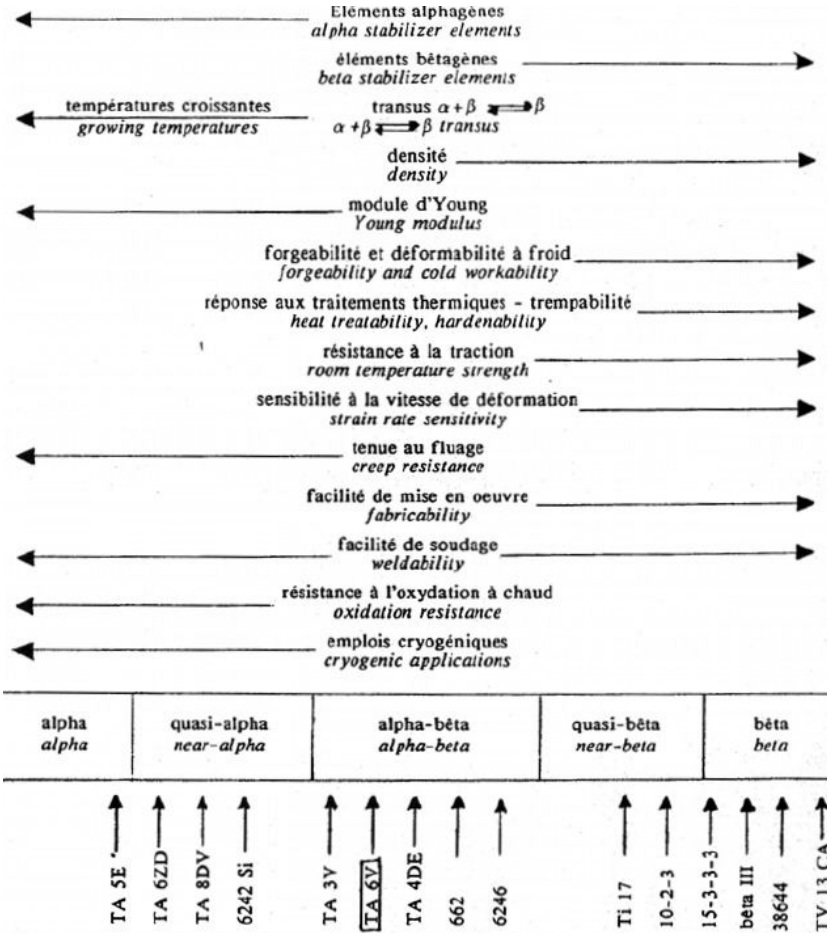


FIGURE 1.4 – Influence des éléments d'addition sur les propriétés mécaniques des différentes classes d'alliages de titane [Tricot, 1988].

La synthèse des propriétés de chaque classe d'alliages de titane proposée sur la figure 1.4, ainsi que les nombreuses références de la littérature, parmi lesquelles on peut citer [Boyer, 1996] et [Lütjering *et al.*, 2000], montrent que :

- les alliages α et quasi-α sont plus utilisés dans l'aéronautique pour leur tenue en température et leur bonne résistance au fluage que pour leurs propriétés mécaniques à température ambiante. Ils restent cependant des candidats crédibles pour les applications à haute température ;

- les alliages $\alpha\beta$, dont le TA6V, présentent des propriétés mécaniques élevées. De fait, ils ont remplacé les alliages d'aluminium et les aciers dans un grand nombre de pièces aéronautiques travaillant à des températures de l'ordre de 350°C – 400°C ;

- les alliages β et quasi-β, qu'on réunit sous l'appellation d'alliages β-métastable, ont globalement la meilleure résistance mécanique et une bonne ténacité. Par ailleurs, ils présentent des modules d'Young plus faibles que les autres classes d'alliages de titane, ce qui facilite leurs mises en forme.

1.2 Mécanismes de déformation dans les alliages de titane

1.2.1 Elasticité

Les tenseurs d'élasticité des deux phases possèdent des symétries liées à leurs structures cristallographiques : ainsi, le tenseur d'élasticité de la phase α présente une symétrie isotrope transverse et celui de la phase β une symétrie cubique. Le tableau 1.2 répertorie les constantes élastiques trouvées dans la littérature pour les phases α et β.

Phase	Références	Alliage	C_{1111}	C_{1122}	C_{1133}	C_{3333}	C_{2323}
α	[Brandes et Brook, 1992] [Petry *et al.*, 1991]	Pure	168	95	69	191	48
α	[Brandes et Brook, 1992]	Pure	160	90	66	181	46.5
α	[Simmons et Wang, 1971]	?	162	92	69	180	47
β	[Brandes et Brook, 1992] [Petry *et al.*, 1991]	Pure	134	110	110	134	55
β	[Reid *et al.*, 1973]	Ti-40at.%Nb	156.5	111.6	111.6	156.5	39.6
β	[Herbig, 2011]	TiBeta21S	153	101	101	153	57
β	[Ledbetter *et al.*, 2004]	Pure	97.7	82.7	82.7	97.7	37.5
β	[Fréour *et al.*, 2002]	Ti17	174	116	116	174	41
β	[Fréour *et al.*, 2011]	Ti17	167	115	115	167	44
β	[Tane *et al.*, 2008]	Ti-29Nb-Ta-Zr	65.1	40.5	40.5	65.1	32.4
β	[Tane *et al.*, 2008]	Ti-25Nb-Ta-Zr	90.8	55.9	55.9	90.8	35.8

TABLE 1.2 – Constantes élastiques de la littérature pour les phases α et β en GPa (température ambiante).

Au regard de la littérature, il apparaît que dans la majorité des cas la phase β est plus encline à se déformer élastiquement. Cette observation est en accord avec le fait que les alliages β-métastable, qui ont les plus grandes fractions de phase β, présentent les modules d'Young les plus faibles dans la classification des alliages de titane. Par ailleurs, le rapport entre les constantes d'élasticité présentées dans la table 1.2 laisse supposer que l'élasticité des deux phases est fortement anisotrope. Cette anisotropie sera quantifiée dans le cadre de ce travail (Tab.3.2).

1.2.2 Plasticité

La déformation plastique au sein d'un métal ou d'un alliage métallique est provoquée par le déplacement de défauts linéaires dans la maille cristalline : les dislocations. Ces dernières vont se déplacer selon certaines directions de glissement, dans des plans réticulaires spécifiques, généralement les plans denses. Cette combinaison d'un plan et d'un vecteur de glissement définit un système de glissement. A plus grande échelle, le mouvement d'un grand nombre de dislocations dans un même plan de glissement génère des bandes de glissement.

Du point de vue mécanique, si un monocristal est soumis à un effort représenté par un tenseur de contrainte, c'est la composante du cisaillement dans le plan projetée sur un système de glissement donné qui sera prise en compte comme variable critique déclenchant le glissement plastique (Fig.1.5). Cette cission résolue (τ^s) appartient au plan de glissement et s'oriente

suivant le vecteur de Burgers. En traction uniaxiale, elle peut être calculée à partir de la contrainte appliquée (σ) de la manière suivante :

$$\tau^s = \sigma m_s \quad \text{avec } m_s = cos(\theta)cos(\chi) \tag{1.1}$$

Le terme m_s, appelé facteur de Schmid, est défini grâce aux angles θ et χ qui donnent la position relative du plan et de la direction de glissement par rapport à la direction de traction. Plus sa valeur, comprise entre 0. et 0.5, sera élevée, plus le système de glissement sera favorablement orienté pour la déformation plastique. L'activation de ce système se fera si la contrainte de cisaillement τ^s atteint une valeur spécifique que l'on appellera cission résolue critique (CRSS pour "critical resolved shear stress").

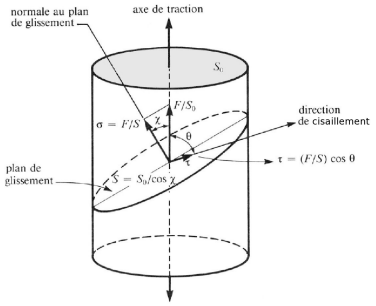


FIGURE 1.5 – Loi de Schmid : projection de l'effort appliquée sur un plan de glissement et cission résolue résultante.

Certains matériaux métalliques, notamment ceux de structure hexagonale compacte, peuvent se déformer plastiquement à température ambiante selon un autre mécanisme de déformation : le maclage. Le taux de cisaillement est alors fonction du plan et de la direction de maclage dans la maille cristalline (Fig.1.6). Si ce mécanisme reste courant dans les alliages de titane α ou quasi-α, plusieurs études [Zaefferer, 2003][Bridier, 2006] ont montré qu'il est négligeable dans les alliages de titane biphasés. Il ne sera donc pas pris en compte dans le cadre de notre travail.

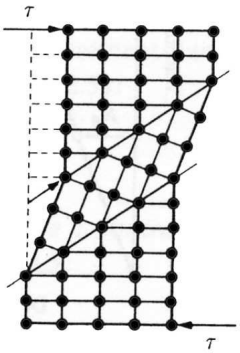


FIGURE 1.6 – Principe du maclage.

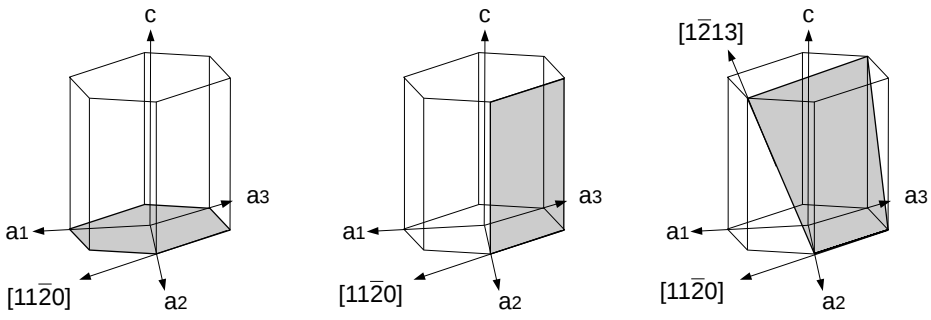
1.2.3 Systèmes de glissement dans la phase α

Dans les alliages de titane, la plasticité de la phase α est représentée par quatre familles de systèmes de glissement (Tab.1.3). Les plans basaux et prismatiques ayant la compacité la plus grande, ils sont des candidats naturels pour contenir le glissement (Fig.1.7). Les

vecteurs correspondant aux directions $< 11\bar{2}0 >$ sont les plus utilisés par les systèmes de glissement, ce qui reste cohérent puisqu'il s'agit des plus petits vecteurs du réseau *hcp*. Le dernier type de plans de glissement est le $\{1\bar{1}01\}$ (Fig.1.7). Il présente l'avantage de permettre un cisaillement suivant la direction préférentielle $< 11\bar{2}0 >$, mais également suivant un vecteur de Burgers de type $< c+a >$. Ce mode de glissement reste très minoritaire à température ambiante, néanmoins, l'écoulement plastique dans cette direction est fondamental du point de vue de la mécanique des milieux continus puisqu'il assure une déformation homogène du matériau, comme par exemple dans le cas où la force appliquée est parallèle à l'axe c.

Type	Vecteur de Burgers	Plan de glissement	Nombre
Basal $< a >$	$< 11\bar{2}0 >$	$\{0001\}$	3
Prismatique $< a >$	$< 11\bar{2}0 >$	$\{10\bar{1}0\}$	3
Pyramidal $< a >$	$< 11\bar{2}0 >$	$\{1\bar{1}01\}$	6
Pyramidal $< c+a >$	$< 11\bar{2}3 >$	$\{\bar{1}011\}$	12

TABLE 1.3 – Systèmes de glissement dans la phase α.



(0001) $(1\bar{1}00)$ $(\bar{1}101)$

FIGURE 1.7 – Plans de glissement pour la phase α.

Un grand nombre de valeurs de CRSS peuvent être rencontrées dans la littérature pour les familles de systèmes de glissement de la phase α. Dans la table (Tab.1.4) sont présentées certaines d'entre elles, et notamment celles qui ont été établies par l'analyse des bandes de glissement dans les nodules α. On peut remarquer que les CRSS des systèmes de glissement avec un vecteur de Burgers $< a >$ sont assez proches, tandis que la CRSS des systèmes pyramidaux $< c+a >$ peut atteindre plus du double de ces valeurs.

	TA6V, compression	TA6V, traction	Ti-6.6Al, traction	Ti5553, traction
basal $< a >$	444 MPa	373 MPa	440 MPa	538. MPa
prismatique $< a >$	392 MPa	388 MPa	390 MPa	549. MPa
pyramidal $< a >$	/	/	/	546. MPa
pyramidal $< c+a >$	/	/	840 MPa	/

TABLE 1.4 – CRSS dans la phase α à température ambiante mesurée dans les nodules du TA6V [Jones et Hutchinson, 1981], [Bridier, 2006], du Ti-6.6Al monocristallin [Lütjering et Williams, 2007] et du Ti5553 [Duval, 2012].

Une étude statistique proposée par [Duval, 2012], et basée sur l'analyse des bandes de glissement dans les nodules α du Ti5553, a permis de mettre en évidence la contribution à la déformation des différentes familles de systèmes de glissement de la phase α. Selon les auteurs, à température ambiante le glissement basal est prépondérant ($\sim$ 60%), tandis que le glissement prismatique ($\sim$ 22%) et le glissement pyramidal ($\sim$ 18%) sont moins présents.

1.2.4 Systèmes de glissement dans la phase β

Concernant la phase β, de type cubique centré, le mouvement des dislocations se fait dans les plans cristallographiques {110}, {112}, {123}, suivant la famille de directions $< 111 >$, qui est la direction de plus grande compacité (Tab.1.5, Fig.1.8).

Vecteurs de Burgers	Plan de glissement	Nombre
$< 111 >$	{110}	12
$< 111 >$	{112}	12
$< 111 >$	{123}	24

TABLE 1.5 – Systèmes de glissement dans la phase β.

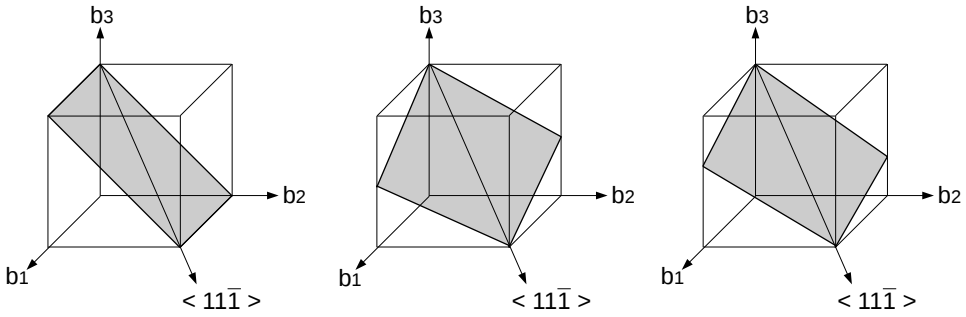


FIGURE 1.8 – Plans de glissement pour la phase β.

La déformation de la phase β a jusqu'à présent été très peu étudiée en raison de sa proportion très faible dans la plupart des alliages de titane. Certains auteurs la considère souvent comme

indéformable plastiquement à température ambiante, ou avec une limite d'élasticité plus élevée que celle de la phase α : presque trois fois plus importante dans le cas des alliages Ti-Mn par exemple [Ankem et Margolin, 1986].

1.2.5 Désorientation entre les phases α et β

Dans les alliages de titane, lorsque l'on applique les relations de Burgers, on constate des désorientations au niveau cristallographique, dues au fait que les diagonales du cube ne forment pas entres elles un angle de 120° (Fig.1.9). En conséquence, pour une relation de Burgers donnée, seul un des axes du plan basal est parfaitement aligné avec une des directions de la phase β. Expérimentalement, cet écart angulaire a été observé par des clichés de diffraction des phases α et β dans le plan $(0001)_\alpha//\{101\}_\beta$ des colonies lamellaires du Ti-5Al-2,5Sn-0,5Fe [Suri *et al.*, 1998] et du Ti6242 [Savage *et al.*, 2004].

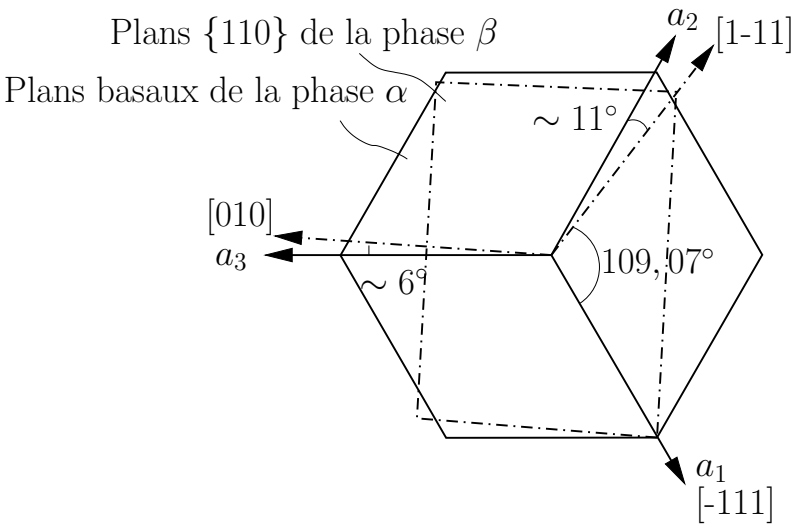


FIGURE 1.9 – Représentation schématique des vecteurs de Burgers pour les deux phases dans le plan de glissement $(0001)_\alpha//(101)_\beta$ et écarts angulaires associés.

Cet écart angulaire a une influence certaine sur la précipitation de la phase α dans la phase β. Il est par exemple pris en compte dans des calculs en champs de phase [Settefrati, 2012]. Néanmoins, son influence sur la plasticité reste à démontrer. Certains auteurs [Venkatarami *et al.*, 2007a], [Venkatarami *et al.*, 2007b] et [Kuzmenkov, 2012], considèrent qu'il augmente considérablement la résistance à la transmission du cisaillement des dislocations entre les deux phases, et qu'il faut par conséquent attribuer à chaque direction de cisaillement une CRSS spécifique. Des observations expérimentales [Castany, 2007] tendent cependant à prouver le contraire : dans les colonies lamellaires du TA6V, des dislocations peuvent cisailler simultanément les lamelles α et β, même pour le plus grand écart angulaire (Fig.1.10).

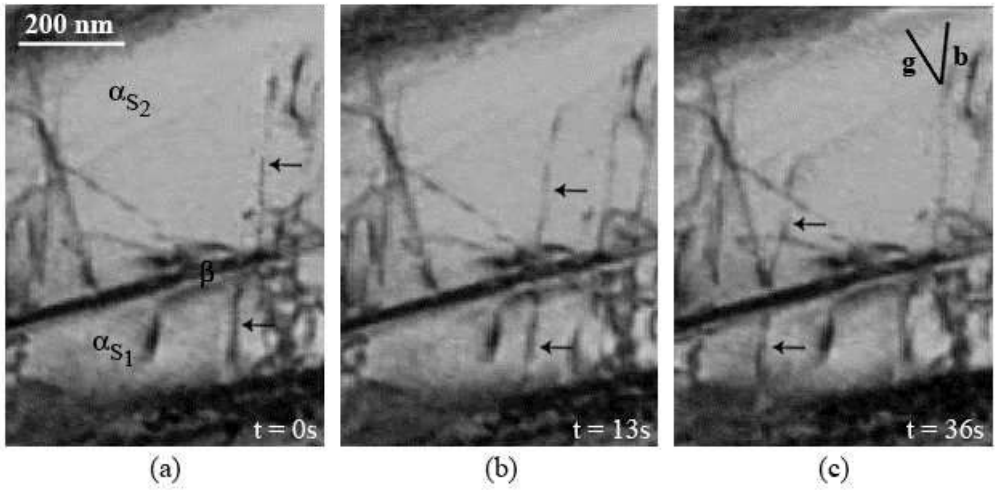


FIGURE 1.10 – Observation *in-situ* du cisaillement simultané de deux lamelles α séparées par une lamelle β. Les vecteurs de Burgers des phases α et β sont respectivement suivant les directions $[11\bar{2}0]$ et $[11\bar{1}]$, ce qui correspond à un écart angulaire de 11°, [Castany, 2007]

1.3 Microstructures

Il est bien connu dans les alliages de titane que les propriétés mécaniques sont fortement dépendantes de la microstructure. On sait également qu'au travers des traitements thermomécaniques, il est possible d'obtenir une grande diversité de microstructures, et donc de propriétés mécaniques. Ceci peut être un avantage puisqu'on peut alors conjuguer plusieurs morphologies de précipitation dans le but d'optimiser les propriétés mécaniques.
Le choix des traitements thermomécaniques pour un alliage de titane donné peut être facilité par la connaissance des diagrammes d'équilibre qui définissent les domaines de stabilité des différentes phases. On présente donc ci-après les transformations de phase dans le Ti17 et dans le Ti5553 qui ont lieu après mise en solution dans le domaine β. Il est à noter que les séquences de transformation à partir de l'ambiante ont également été répertoriées pour le Ti5553 sous la forme d'un diagramme TCC (Transformation Continue au Chauffage) par [Settefrati, 2012]. Il apparaît que la vitesse de chauffage a une grande influence sur les séquences de transformation et la formation des microstructures.

1.3.1 Séquences de précipitation $\beta \rightarrow \alpha$

La microstructure est conditionnée par l'histoire thermomécanique qu'a subi l'alliage. Lorsque l'on refroidit à partir du domaine β, plusieurs morphologies de phase α peuvent apparaître. Les diagrammes TTT (Temps-Température-Transformation), qui peuvent être déterminés à partir de courbes de résistivité électrique, permettent de représenter simplement les différentes morphologies de précipités α qui peuvent apparaître lors de la transformation $\beta \rightarrow \alpha$, après mise en solution dans le domaine β. Ces diagrammes sont présentés par la suite pour le Ti5553 (Fig.1.11 - [Settefrati, 2012]) et le Ti17 (Fig.1.12 - [Da Costa Teixeira, 2005]).

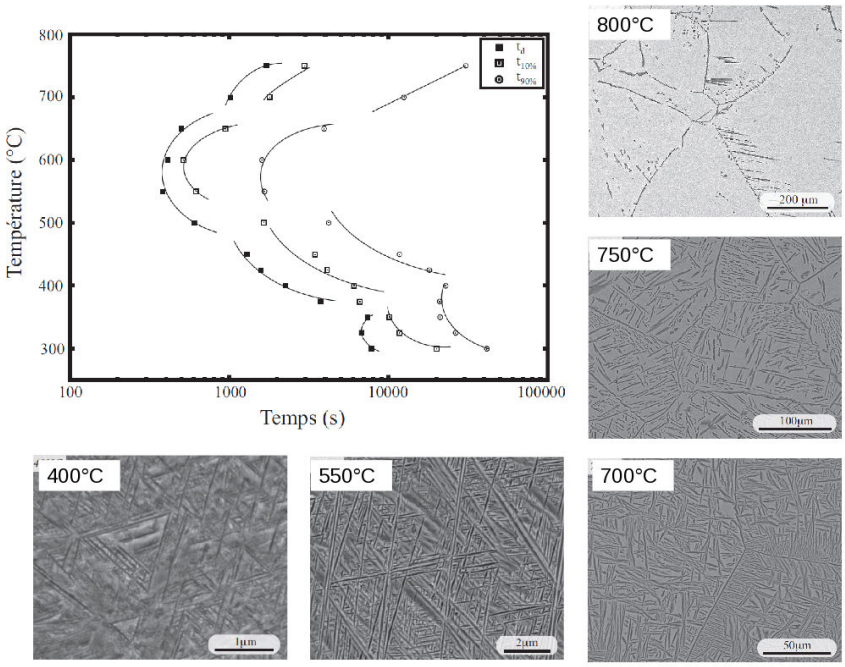


FIGURE 1.11 – Diagramme TTT de l'alliage de titane Ti5553 et microstructures associées aux différents traitements isothermes, [Settefrati, 2012].

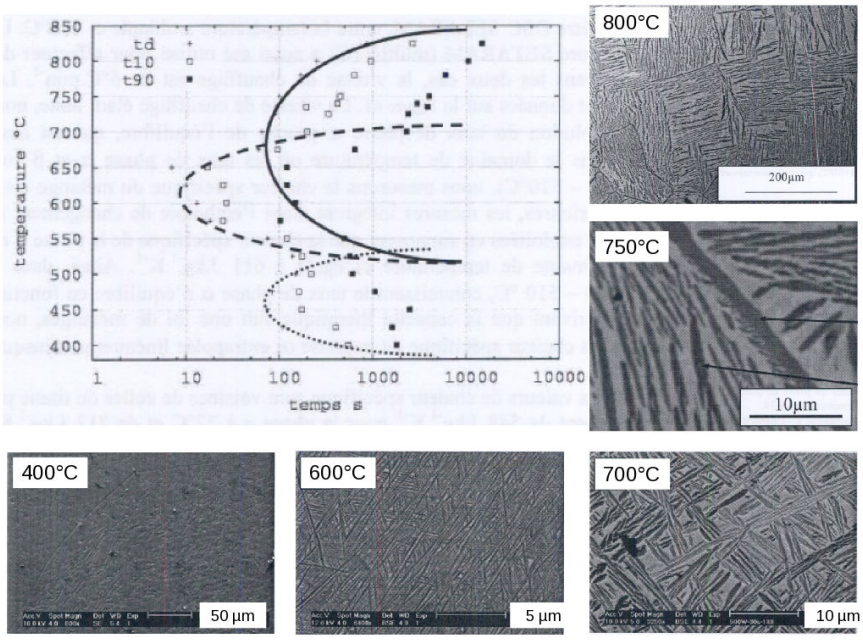


FIGURE 1.12 – Diagramme TTT de l'alliage de titane Ti17 et microstructures associées aux différents traitements isothermes, [Da Costa Teixeira, 2005].

• Pour un traitement isotherme à T<T_β, la germination va commencer préférentiellement aux joints de grains β. Des liserés assez épais vont croître, en accord avec les relations cristallographiques d'un des deux grains β concernés. La croissance longitudinale va progressivement diminuer au profit de l'épaisseur, formant ainsi une bande le long des joints de

grains β. Dans la littérature, on appelle cette première morphologie α_{GB} (Grain Boundary).

• A l'aplomb de cette première bande de précipités α_{GB}, des colonies de lamelles parallèles vont se développer, perpendiculairement ou à 120 degrés par rapport à la bande α_{GB}, de manière à minimiser l'énergie élastique globale. Cette morphologie est appelée α_{WGB} (Widmanstätten Grain Boundary). La précipitation de α_{GB} et de α_{WGB} se fait par diffusion des éléments d'alliage. De fait, entre les lamelles α_{WGB}, la phase β est enrichie en éléments bêtagènes.

• Si la température de traitement est encore plus basse, la force motrice de germination peut atteindre une valeur seuil, pour laquelle la germination intragranulaire est possible. Des précipités très fins et très enchevêtrés apparaissent, la microstructure devenant de plus en plus dense avec la baisse de température. On appelle ce type de morphologie α_{WI} (Widmanstätten Intragranulaire). Il a été observé par [Settefrati, 2012] que pour des températures inférieures à 410°C dans le Ti5553, le processus de transformation fait intervenir une phase intermédiaire de structure orthorhombique, la phase α".
Lors de la précipitation intragranulaire, on peut constater que les précipités optent parfois pour un arrangement en "triangle" selon le plan de coupe (cf. micrographies à 550°C de la figure 1.11). Des travaux récents en champs de phases [Settefrati, 2012] montrent que ces précipités α_{WI} ont en réalité une forme d'ellipsoïdes aplatis (Fig.1.13), dont l'orientation morphologique est théoriquement gouvernée par la configuration cristallographique (variants). L'arrangement en triangle des précipités α est alors retrouvé lorsque l'on les observe dans le plan de coupe $\{111\}_\beta$, voisin du plan d'habitat $\{334\}_\beta$. On peut donc supposer que les variants α en présence dans ces microstructures particulières partagent le même plan de type $\{111\}_\beta$.

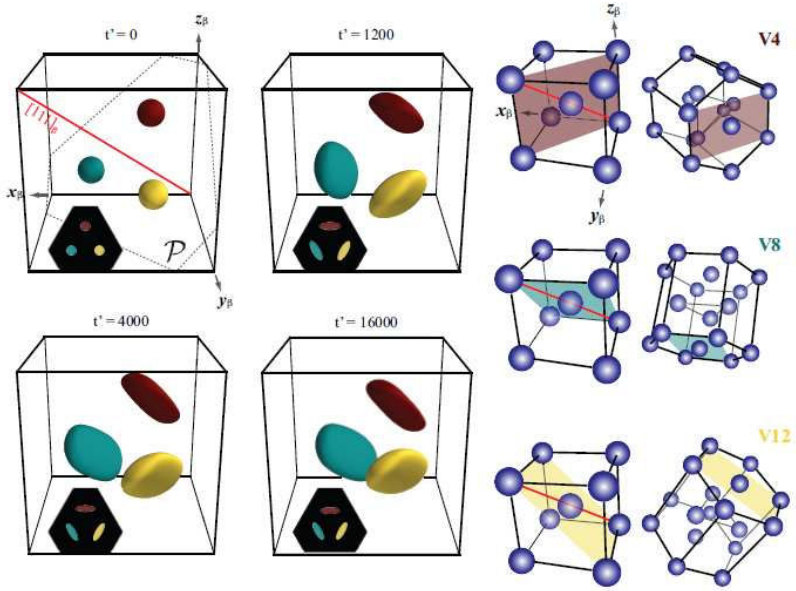


FIGURE 1.13 – Simulation 3D en champs de phases de la croissance de trois germes issus de variants cristallographiques différents. En parallèle, des calculs 2D ont été fait dans le plan $\{111\}_\beta$ (en bas à gauche de chaque volume représentatif de matière), [Settefrati, 2012] .

Les auteurs ont également défini les facteurs de forme caractéristiques du précipité (Fig.1.14), en minimisant l'énergie d'un système composé d'un précipité ellipsoïdal dans une matrice β. Cette énergie se compose de l'énergie élastique associée aux contraintes

résiduelles et de l'énergie d'interface (Fig.1.15).

$$\frac{a_1}{a_2} = 1.8$$

$$\frac{a_3}{a_2} = 0.036$$

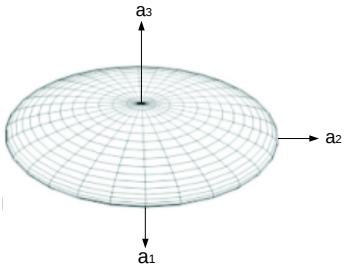


FIGURE 1.14 – Ellipsoïde aplati ($a_1 > a_2 >> a_3$) et rapports d'aspect dans les conditions d'équilibre.

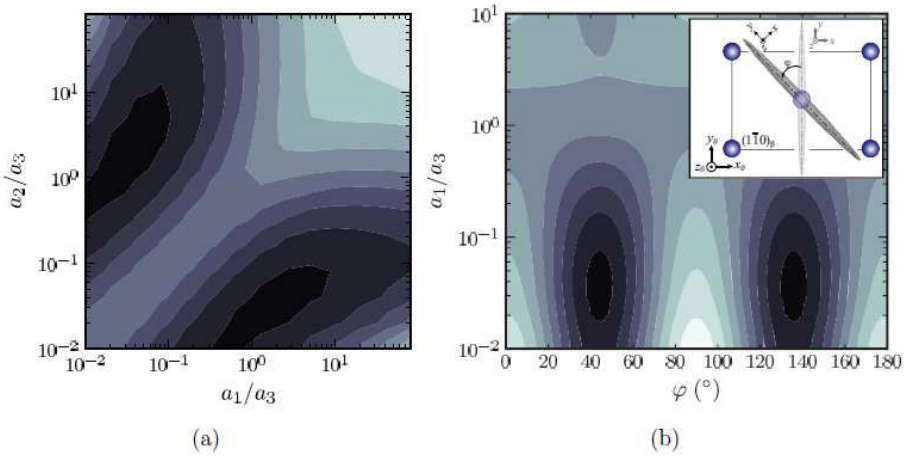


FIGURE 1.15 – Evolution de l'énergie du système en fonction de l'angle φ d'orientation morphologique dans le plan $(1\bar{1}0)$ et des rapports d'aspect, [Settefrati, 2012] .

1.3.2 Influence des traitements thermomécaniques

• La déformation du matériau lors d'un traitement thermomécanique est par exemple utilisée dans le cas du Ti5553 pour créer une morphologie nodulaire (Fig.1.16), ce qui permet d'étendre la ductilité de l'alliage. Les nodules sont donc issus d'un corroyage dans le domaine $\alpha + \beta$, à la suite d'un refroidissement à partir du domaine β. Les précipités α, fragmentés lors du corroyage, vont se dissoudre et coalescer lors du recuit pour former des nodules. Il est également possible de les obtenir lors des traitements thermiques, par germination aux joints de grains β ainsi qu'aux sous-joints de grains.

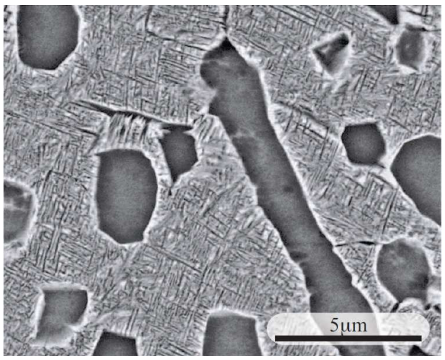


FIGURE 1.16 – Nodules α dans le Ti5553, MEB [Duval, 2012].

• Dans les alliages de titane, on a rappelé précédemment que la précipitation de la phase α commençait de manière préférentielle aux joints de grains. Cette précipitation est souvent grossière, ce qui en fait des zones fragiles, notamment en fatigue. De plus, il s'agit éventuellement des zones les plus écrouies puisque les mouvements des dislocations sont souvent gênés par leur présence. Pour cette raison, on cherchera à transformer la microstructure des joints de grains lors des traitements thermomécaniques.

Dans le Ti5553, la microstructure aux joints de grains se caractérise souvent par des liserés de nodules, ce qui rend cette partie de la microstructure plus ductile. Dans d'autres alliages de titane, comme le Ti6242 et le TA6V, la précipitation aux joints de grains peut conduire à des défauts plus critiques : les macrozones. Il s'agit de groupes de précipités α ayant en commun configuration géométrique et orientation cristallographique. Lorsque la précipitation a lieu de part et d'autre d'un joint de grain β, un élément microstructural en forme de plume pouvant atteindre plusieurs millimètres de longueur est obtenu (Fig.1.17). Du fait de la différence d'orientation cristallographique entre les deux macrozones, les "plumes" sont des sites préférentiels d'amorçage de fissures en fatigue, et notamment pour l'effet "Dwell", qui peut apparaître en fatigue avec temps de maintien. On notera qu'une récente étude a cherché à simuler les contraintes qui peuvent apparaître dans ces macrozones pour comprendre leur rôle [Kuzmenkov, 2012].

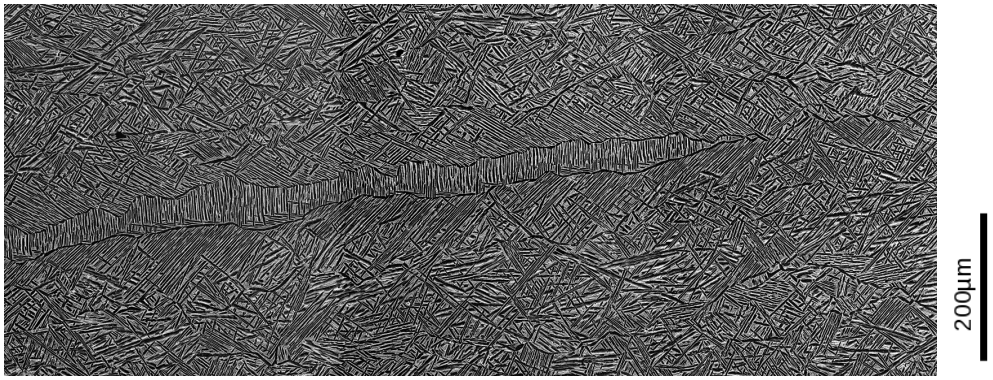


FIGURE 1.17 – Macrozone dans le Ti6242, MEB (communication interne : P. Villechaise et I. Freiherr von Thüngen).

• Lorsqu'au travers de traitements thermomécaniques on parvient à faire disparaître la microstructure particulière qui peut se trouver aux joints de grains β, cela ne signifie pas que l'on a effacé également le joint de grain. Ce dernier reste le lieu de transition entre deux orientations cristallographiques distinctes. On constate également que même si des zones de désorientation peuvent apparaître lors du forgeage, la matrice β conserve globalement la même orientation cristalline (Fig.1.18). On montrera par la suite que cette différence d'orientation entre deux ex-grains β peut provoquer d'importantes déformations aux joints de grains (Fig.1.34).

Dans le cadre du projet PROMITI, on a cherché à relier les différentes microstructures présentées en section 1.3.1 et 1.3.2 aux propriétés mécaniques. Pour cela des traitements thermiques spécifiques ont été proposés pour créer des microstructures de Ti5553 et de Ti17 plus simples et plus facilement étudiables (B.Denand, A. Settefrati – IJL). Pour chaque microstructure, un essai de traction uniaxiale a été effectué, ce qui permet de faire le lien entre les tailles, les formes et les fractions volumiques de phase, et certaines propriétés mécaniques

telles que le module d'Young, la limite d'élasticité, la ductilité ou encore l'écrouissage. Ces considérations pourront ensuite être utiles pour appréhender les microstructures industrielles qui sont plus complexes.

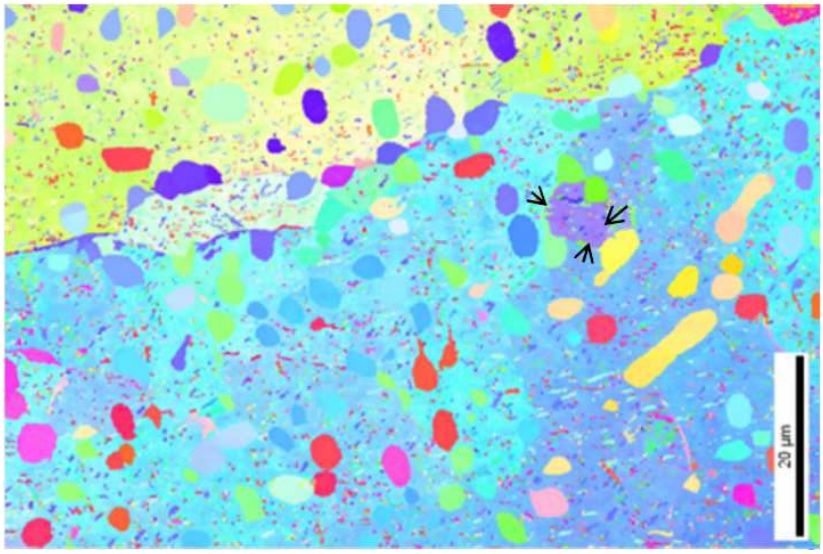


FIGURE 1.18 – Carte EBSD-MEB d'un joint de grain séparant deux ex-grains β (l'un de couleur verte, l'autre de couleur bleu) dans le Ti5553. On observe également des zones de désorientation de la phase β dues aux traitements thermomécaniques (zone de couleur violette par exemple, délimitée par trois flèches). [Duval, 2012].

1.3.3 Présentation des microstructures du Ti17

Cet alliage contient 17% d'éléments d'addition, d'où l'abréviation Ti17. Sa composition chimique est donnée dans le tableau suivant (Tab.1.6).

Élément	Al	Mo	Cr	Zr	Sn	O	Ti
%wt	5	4	4	1.9	2	0.1	Bal.

TABLE 1.6 – Composition chimique moyenne du Ti17 en % massique.

Les microstructures modèles présentées par la suite, sont issues de différents traitements thermiques [Aeby-Gautier *et al.*, 2011]. Dans tous les cas, l'alliage a d'abord subi une mise en solution dans le domaine β (920°C pendant 15 minutes), puis un maintien dans le domaine α+β dans le but de faire précipiter les lamelles de phase α. La morphologie de ces lamelles et la façon dont elles vont apparaître dépendent de la température et du temps de maintien. Plusieurs familles de précipités peuvent coexister si on utilise plusieurs paliers de température. Par ailleurs, en jouant sur le refroidissement après maintien, on pourra moduler la fraction volumique de phase β retenue à l'ambiante. Un des échantillons est trempé après mise en solution pour obtenir une microstructure 100% β. Les autres échantillons suivent ensuite différents traitements thermiques jusqu'à l'obtention de microstructures caractéristiques, dont la description est donnée dans le tableau 1.7. Une description de l'ensemble des microstructures modèles et des traitements thermiques est donnée en Annexe B.1.
Un lot matière de Ti17 provenant d'une billette forgée a également été fournie par Snecma. Sa microstructure est montrée ci-après (Fig.1.19).

#	1ère morph. de précipités α	Frac. vol.	Epaisseur (μm)	2e morph. de précipités α	Frac. vol.	Epaisseur (μm)
2a60a	α_{GB+WGB}	51%	1.77	-	-	-
2a60b	α_{GB+WGB}	59%	2.42	-	-	-
3a60	α_{GB+WGB}	57%	1.04	-	-	-
4a60	α_{GB+WGB}	66%	0.60	-	-	-
5a60	α_{WI}	69%	0.27	-	-	-
6a60	α_{WI}	61%	0.09	-	-	-
7a30	α_{GB+WGB}	33%	1.91	-	-	-
8a30	α_{GB+WGB}	37%	0.42	-	-	-
9a60a	α_{GB+WGB}	29%	1.52	α_{WI}	40%	0.17
9a60b	α_{GB+WGB}	27%	2.20	α_{WI}	40%	0.14
10a60a	α_{WI}	40%	0.76	α_{WI}	27%	0.12
10a60b	α_{WI}	30%	0.50	α_{WI}	43%	0.07
11a30	α_{WI}	40%	0.28	-	-	-
Snecma	α_{GB+WGB}	10%	1.00	α_{WI}	60%	0.52

TABLE 1.7 – Récapitulatif des différentes microstructures modèles du Ti17 et comparaison avec la microstructure Snecma.

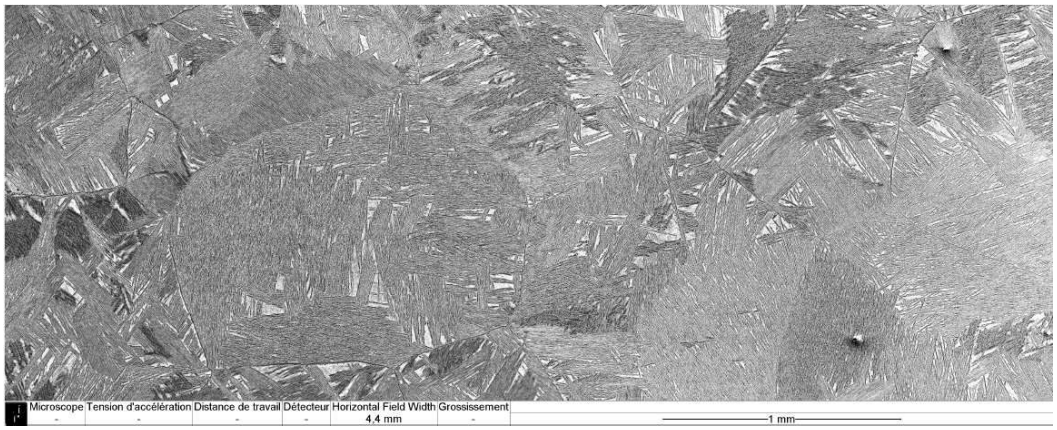


FIGURE 1.19 – Cliché MEB de la microstructure du Ti17 Snecma, [Duval, 2012].

On observe des ex-grains β dont la taille varie entre 300 μm et 1 mm (Fig.1.20). Au sein de ces ex-grains β, on trouve des sous-domaines dans lesquels des précipités α_{WI} de quelques micromètres de long sont orientées géométriquement dans la même direction. Il est important de noter qu'une orientation géométrique commune n'entraîne pas toujours une même orientation cristalline. L'alliage se compose à 70% de phase α et 30% de phase β. Les analyses EBSD-MEB des précipités α dans le Ti17 faites par [Duval, 2012] montrent qu'en moyenne 5 à 7 variants α coexistent dans un ex-grain β. La figure de pôle présentée à la suite (Fig.1.21), montre que les six plans basaux possibles peuvent être trouvés dans l'ex-grain étudié, mais la différence d'intensité entre les spots montrent aussi que ces six

possibilités ne sont pas équiprobables. Une représentation schématique de la microstructure (Fig.1.22) est aussi proposée à la suite, afin de rappeler les dimensions principales des éléments microstructuraux.

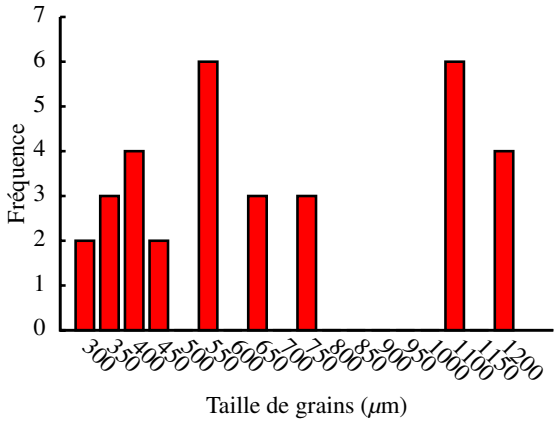


FIGURE 1.20 – Distribution de taille des ex-grains β dans le Ti17 Snecma. [Duval, 2012].

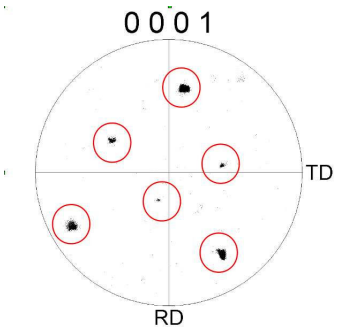


FIGURE 1.21 – Figure de pôles dans un ex-grain β du Ti17 Snecma. [Duval, 2012].

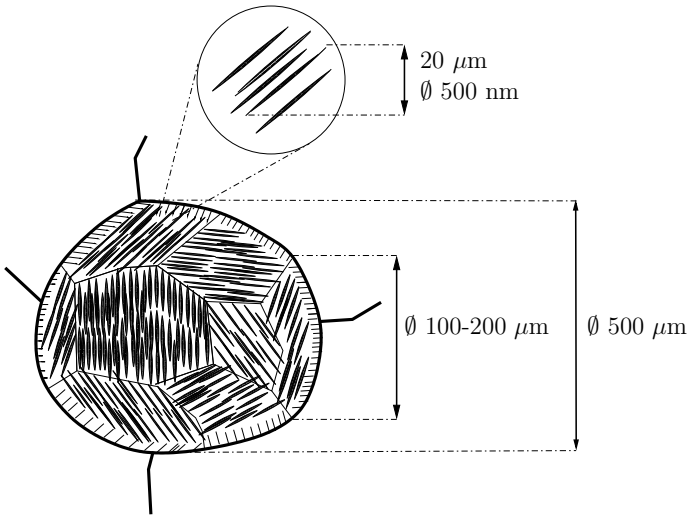


FIGURE 1.22 – Représentation de la microstructure du Ti17 Snecma.

1.3.4 Présentation des microstructures du Ti5553

L'alliage Ti5553 est une version proche de l'alliage VT-22 (Ti-5Al-5V-5Mo-1Cr-1Fe). Sa composition chimique est donnée ci-dessous (Tab.1.8).

Élément	Al	V	Mo	Cr	Fe	C	O	Ti
%wt	5	5.2	5.2	2.7	0.4	0.009	0.154	Bal.

TABLE 1.8 – Composition chimique moyenne du Ti5553 (forgé) en % massique.

Comme pour le Ti17, des microstructures modèles ont été élaborées [Settefrati, 2012]. Après mise en solution, un échantillon est immédiatement trempé pour obtenir une microstructure 100% β. La description complète des microstructures modèles obtenues après traitements thermiques est montrée en annexe B.2. On ajoute aussi dans la comparaison un échantillon de Ti1023 contenant uniquement des nodules α dans la matrice β. Le tableau 1.9 rassemble les fractions et les tailles caractéristiques des différentes microstructures.

#	1ère morphologie de précipités α	Frac. vol.	Epaisseur (μm)	2ème morphologie de précipités α	Frac. vol.	Epaisseur (μm)
11	α_{NOD}	20%	1.20	α_{WI}	29.5%	0.075
12	α_{WI}	48.5%	0.08	-	-	-
13	α_{WI}	23.5%	0.54	-	-	-
14	α_{WI}	15%	0.56	-	-	-
31	α_{WI}	25%	0.8	α_{WI}	23.5%	0.06
32	α_{WI}	50%	0.22	-	-	-
42	α_{GB+WGB}	34.5%	0.90	α_{WI}	11.5%	0.08
44	α_{WI}	17%	0.90	-	-	-
45	α_{WI}	15.5%	0.67	-	-	-
46	α_{NOD}	15%	1.50	α_{WI}	35.5%	0.09
48	α_{WI}	48%	0.30	-	-	-
49	α_{WI}	57%	0.07	-	-	-
52	α_{GB+WGB}	22.5%	1.13	α_{WI}	22.5%	0.25
57	α_{WI}	10%	0.6	α_{WI}	35%	0.067
59	α_{WI}	49.5%	0.27	-	-	-
MBD	α_{NOD}	20%	3.00	α_{WI}	40%	0.13
1023	α_{NOD}	25%	2.50	-	-	-

TABLE 1.9 – Récapitulatif des différentes microstructures modèles du Ti5553 et comparaison avec la microstructure MBD (Messier-Bugatti-Dowty) et la microstructure Ti1023 nodulaire.

La matière industrielle a été fournie par MBD dans un état billette et un état forgé. Lors du traitement thermomécanique, l'alliage va subir un forgeage dans le domaine α+β pour

créer des nodules α qui vont coalescer lors du revenu. Ce revenu fera également apparaître une population plus fine de précipités α dans la matrice β. La microstructure du Ti5553 forgé fournie par MBD est montrée sur le cliché MEB ci-dessous (Fig.1.23).

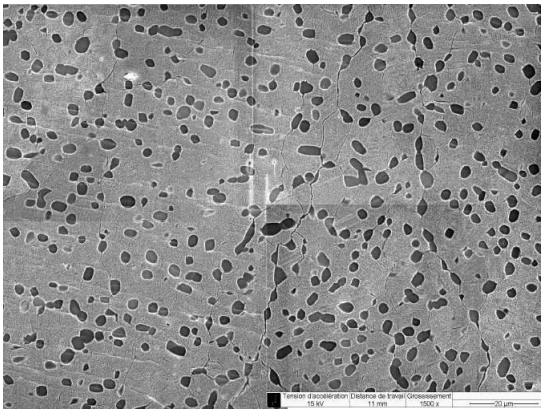


FIGURE 1.23 – Cliché MEB de la microstructure du Ti5553 forgé de Messier Dowty, [Duval, 2012].

En comparaison avec le Ti17, la microstructure industrielle du Ti5553 contient donc des nodules ($\sim 20\%$), qui sont essentiellement présents sous forme de liserés, aux joints de grains et aux sous-joints de grains issus du forgeage. Dans les grains β transformé, dont la distribution de taille est donnée en Fig.1.24, on trouve de fins précipités α_{WI} (40%) d'une longueur proche du micromètre. La phase β résiduelle est donc présente avec une fraction volumique de 40%. Une représentation schématique de la microstructure est donnée à la suite afin de rappeler les dimensions principales de cette microstructure (Fig.1.25). Dans les travaux de [Duval, 2012], les figures de pôles directes EBSD-MEB ont permis de vérifier les relations de Burgers et de mettre en évidence la présence de 5 à 7 variants α au sein de chaque ex-grain β (Fig.1.26).

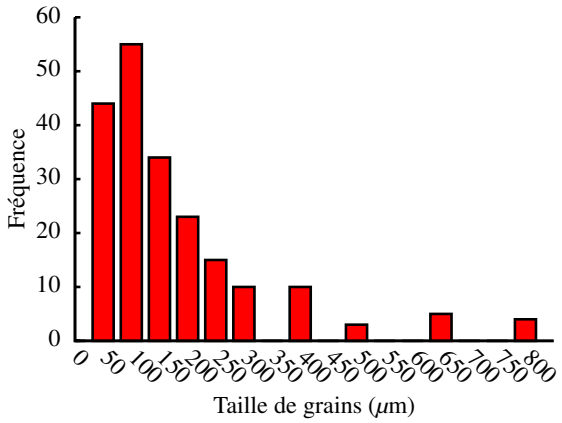


FIGURE 1.24 – Distribution de la taille des ex-grains β, [Duval, 2012].

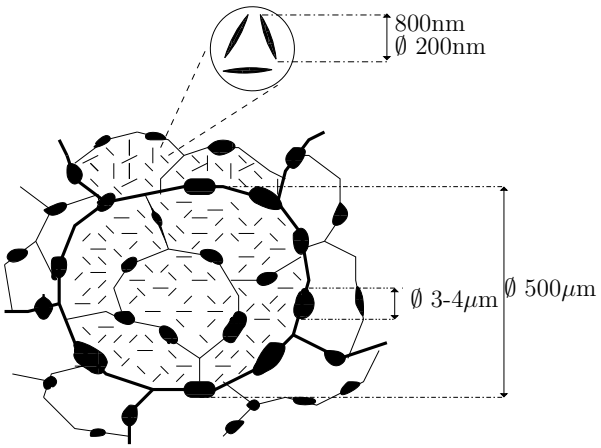
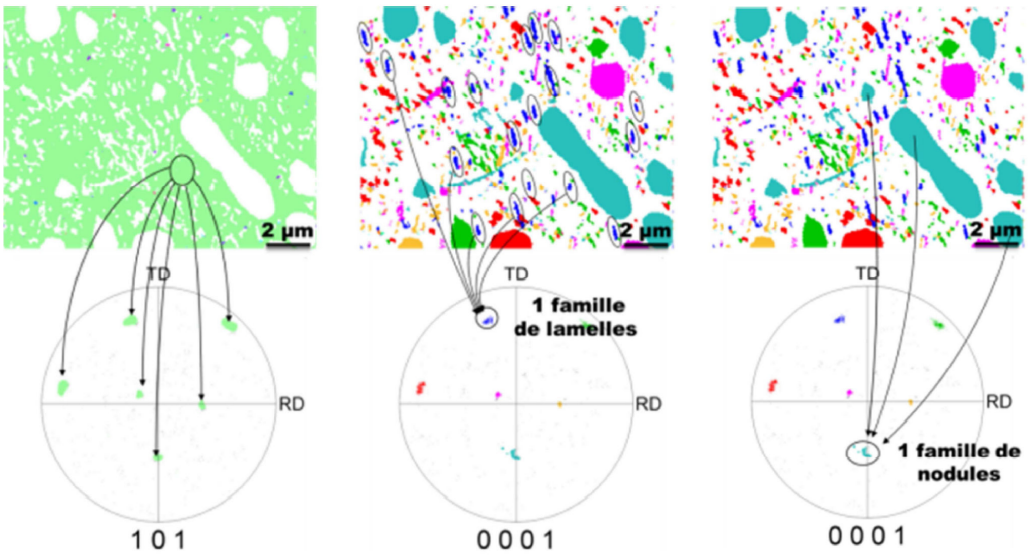


FIGURE 1.25 – Représentation de la microstructure du Ti5553 forgé de Messier Dowty.



Matrice β Lamelles α Nodules α

FIGURE 1.26 – Cartes EBSD-MEB de l'orientation de la matrice β et de celles des précipités α dans un ex-grain β. Les correspondances entre les figures de pôles mettent en évidence les relations de Burgers dans le Ti5553, [Duval, 2012].

1.4 Relations entre propriétés mécaniques et microstructures

Pour chaque microstructure présentée dans les tables 1.7 et 1.9, un essai de traction uniaxiale a été effectué par [Settefrati, Duval, Denand, projet PROMITI]. Les courbes σ–ε sont présentées en annexe B.1 et B.2. Concernant les propriétés en fatigue, on se basera sur les microstructures en Ti5553 testées par [Duval, 2012] (Fig.1.27), et sur celles en Ti17 étudiées par [Delfosse, 2005].

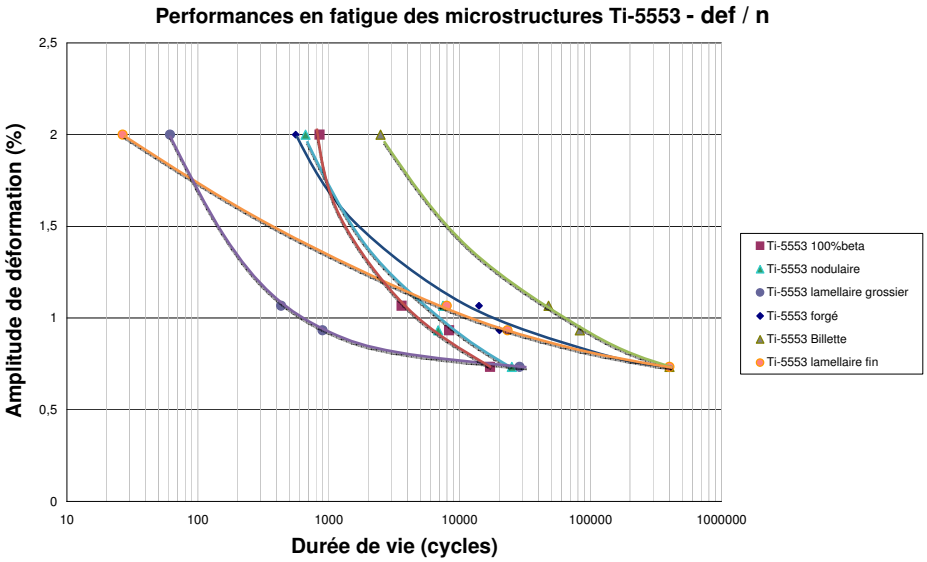


FIGURE 1.27 – Performance en fatigue des microstructures modèles du Ti5553 (les déformations sont normées pour des raisons de confidentialité) , [Duval, 2012].

Certaines conclusions concernant les relations entre microstructures et propriétés mécaniques peuvent être tirées de l'ensemble de ces résultats :

• La microstructure 100% β possède le plus grand allongement à rupture, ce qui est logique puisqu'elle est uniquement composée de grains de grande taille. Néanmoins, cette phase possède une limite d'élasticité assez faible en l'état (800 MPa), ainsi qu'un écrouissage que l'on peut considérer comme nul (Fig.B.2.1).

• La seule présence de nodules α dans la microstructure permet d'augmenter la limite d'élasticité (950 MPa – Fig.B.2.18). Au premier abord, on pourrait supposer que la phase α est par conséquent plus résistante à la déformation plastique que la phase β, mais c'est sans compter sur l'effet de taille, puisque les nodules font quelques micromètres alors que les grains β font quelques millimètres.

• L'influence prépondérante de l'effet de taille sur les propriétés mécaniques est confirmée par les essais sur les microstructures lamellaires. Plus la précipitation de la phase α_{WI} est fine et enchevêtrée, plus la limite d'élasticité et l'écrouissage augmentent. Ce rôle durcissant de la phase α conduit cependant à une réduction de la ductilité. Les performances en fatigue s'en trouvent également affectées : une bonne durée de vie sera obtenue pour des microstructures avec des précipités α ni trop épais, ni trop fins. En conclusion, on retrouve le compromis classique entre résistance à la déformation et allongement à rupture.

• La solution la plus évidente est alors d'utiliser des microstructures bimodales, comme c'est déjà le cas pour les microstructures industrielles. La ductilité est apportée par les nodules

dans le Ti5553 et les lattes primaires dans le Ti17, tandis qu'une haute limite d'élasticité est assurée par la présence d'une sous-précipition de phase α secondaire beaucoup plus fine. Ces microstructures montrent également de bonnes propriétés en fatigue.

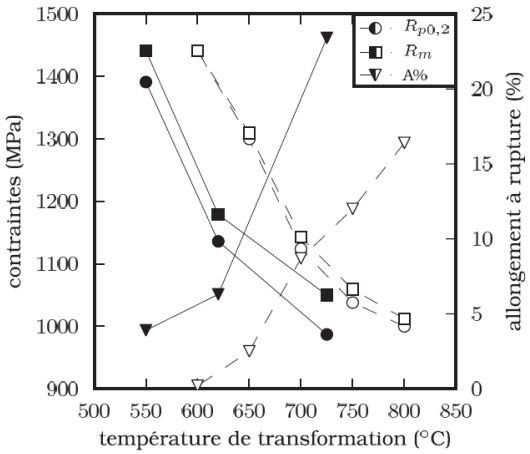


FIGURE 1.28 – Evolution des propriétés de traction en fonction de la température de transformation (Symboles pleins et traits continus pour l'alliage Ti5553 et symboles vides et traits discontinus pour l'alliage Ti17) [Settefrati, 2012].

La synthèse des résultats en traction a été proposée par [Settefrati, 2012], sous la forme d'une figure de rappel (Fig.1.28).

1.5 Observations expérimentales multi-échelles de la déformation plastique

1.5.1 Echelle microscopique

Lorsqu'on s'intéresse aux mécanismes de déformation plastique, avec par exemple des essais *in-situ* au MEB [Duval, 2012], on constate que les bandes de glissement apparaissent en premier lieu dans les nodules (Fig.1.29). Ensuite, la propagation des bandes de glissement reste très difficile à localiser, notamment dans la microstructure très enchevêtrée du Ti17. On peut néanmoins observer au MET [Escalé, 2012] un confinement des dislocations au sein de chacune des phases (Fig.1.30). Si la transmission des dislocations de la phase α vers la phase β peut se trouver facilitée par les relations de Burgers (Fig.1.31), la transmission de β vers α semble plus difficile. Les dislocations ont donc tendance à rester confinées dans les précipités α et la matrice β, ce qui a pour conséquence d'augmenter l'écrouissage et la limite d'élasticité. On comprend donc bien, en accord avec les observations faites sur les microstructures modèles (cf. 1.4), que plus la microstructure sera dense et fine, plus le confinement sera important et donc plus l'écrouissage et la limite d'élasticité augmenteront aux dépens de la ductilité.

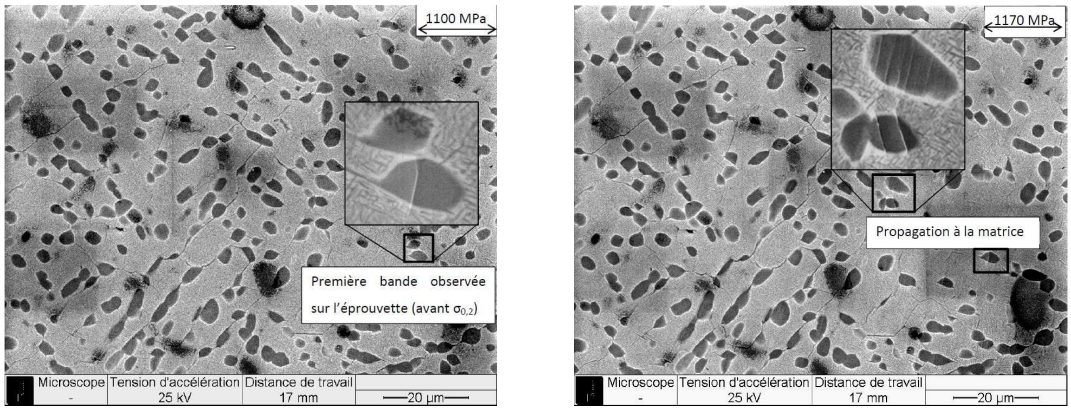


FIGURE 1.29 – Observation *in-situ* de l'initiation de la déformation dans un nodule α et propagation à la matrice β-transformée, MEB [Duval, 2012].

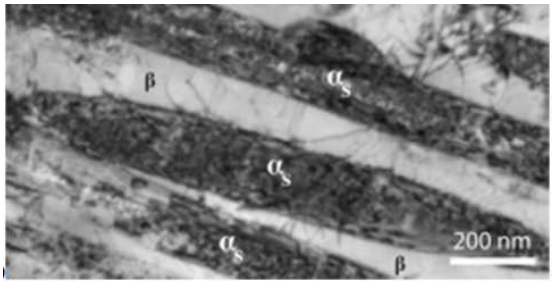


FIGURE 1.30 – Confinement des dislocations dans la phase β du Ti5553, MET [Escalé, 2012].

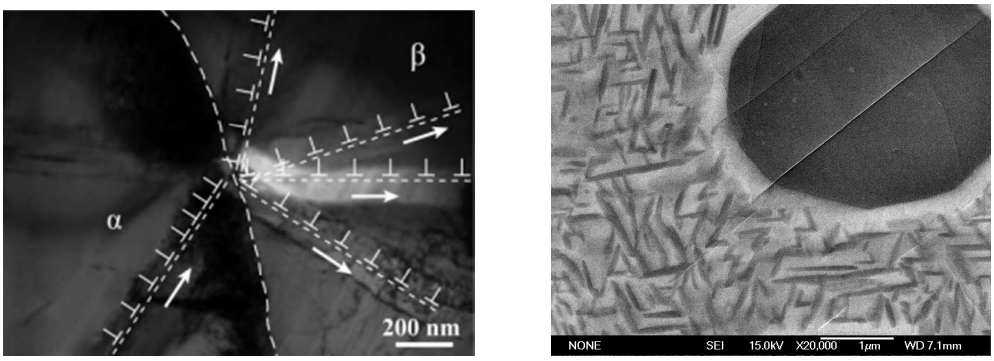


FIGURE 1.31 – A gauche : transmission des dislocations d'un nodule α à la matrice β, MET [Escalé, 2012]. A droite : propagation sans entrave d'une bande de glissement d'un nodule α à la matrice β (zone de déplétion), MEB [Duval, 2012].

1.5.2 Echelle du grain β transformé

Des hétérogénéités de déformation sont aussi observables à plus grande échelle (Fig.1.32). En effet, les essais de traction sur micro-éprouvettes effectués par [Duval, 2012] révèlent un relief en surface après déformation. Des hétérogénéités de déformation élastique et plastique ont été également observées par [Delfosse, 2005] dans le Ti17 Snecma.

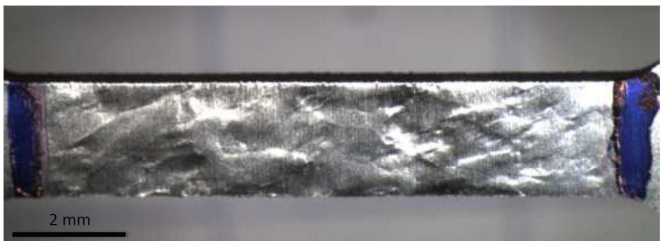


FIGURE 1.32 – Etat de surface d'une micro-éprouvette déformée en Ti5553 [Duval, 2012].

L'essai effectué sur une micro-éprouvette en Ti17 par [Duval, 2012], pour lequel une cartographie EBSD au MEB de la surface et un dépôt de mouchetis avaient été préalablement effectués, a permis de mettre en évidence la correspondance entre l'hétérogénéité de déformation observée sur les micro-éprouvettes (Fig.1.33) et les ex-grains β. En effet, la figure 1.33 montre que les zones de déformation de la micro-éprouvette en Ti17 se calquent assez bien sur les contours des grains β transformé, et que la déformation est relativement homogène au sein de chacun d'eux.

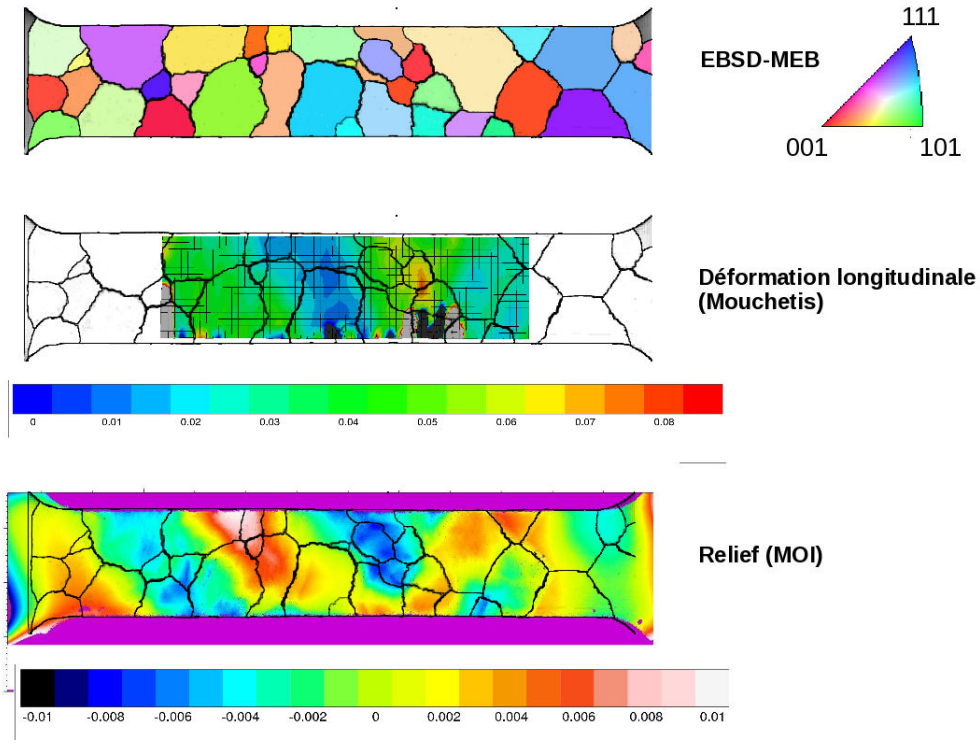


FIGURE 1.33 – Essai de traction uniaxiale sur une micro-éprouvette en Ti17 : carte EBSD-MEB, mesure du champ de déformation longitudinale et du champ de déplacement normal sur la surface supérieure. [Duval, 2012].

En conséquence, on peut dire que l'hétérogénéité de la déformation macroscopique est due aux ex-grains β. De plus, si les incompatibilités de déformation entre ex-grains β voisins sont trop importantes, une sévère déformation plastique aux joints de grains β sera observée (Fig.1.34). Cette disparité de la déformation entre grains β transformé a été quantifiée [Duval, 2012], par l'analyse locale dans une micro-éprouvette en Ti5553 des déformations au sein de cinq ex-grains β différents. Ces déformations ont été obtenues par analyse d'images en prenant les nodules α comme repère. Les résultats montrent que les déformations des ex-

grains β peuvent atteindre respectivement 0.67%, 3.93%, 1.43%, 1.91% et 1.80% pour une déformation macroscopique de 1.87%, ce qui confirme les grandes hétérogénéités constatées à cette échelle.

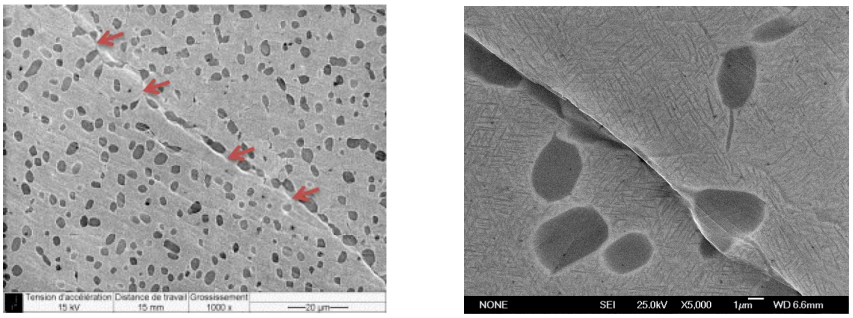


FIGURE 1.34 – Bandes de glissement aux joints de grains β du Ti5553 MBD, MEB [Duval, 2012].

Le grain β transformé a également une influence en fatigue. En étudiant les orientations cristallographiques de la phase β lors de ses essais de fatigue en flexion plane, [Delfosse, 2005] met en avant le fait que les ex-grains β contenant le plus d'endommagement sont ceux dont la direction $< 110 >$ est parallèle à l'axe de sollicitation. Cette observation a également été faite par [Duval, 2012] dans le Ti5553.

1.6 Conclusions partielles

Les alliages de titane sont des matériaux complexes, d'une part du fait de leurs microstructures qui sont généralement fines et enchevêtrées, et d'autre part du fait des relations cristallographiques particulières qui existent entre les phases. On verra dans ce travail qu'il s'agit de deux points critiques à appréhender lorsque l'on cherche à simuler leur comportement.

Les microstructures dans ces alliages ont une grande influence sur les propriétés mécaniques. La maîtrise des traitements thermomécaniques permet donc d'optimiser simplement les propriétés mécaniques que l'on recherche. Dans cet esprit, des microstructures modèles ont été fabriquées et étudiées au sein du projet PROMITI. La principale conclusion de cette étude est que le confinement des dislocations au sein des phases joue un rôle prédominant dans les propriétés mécaniques. L'approche selon laquelle on chercherait à définir les propriétés des phases α et β de manière individuelle n'a donc pas de sens. Les propriétés mécaniques des phases doivent être impérativement liées à la microstructure. Ce travail nous donne l'opportunité de dégager des courbes de tendance qui viendront enrichir les modèles numériques.

Lorsque l'on s'intéresse aux mécanismes de la déformation, on s'aperçoit que plusieurs échelles sont à prendre en compte :

- l'échelle la plus fine est celle des précipités α et de la matrice β. C'est ici que le confinement des dislocations dicte le comportement macroscopique ;
- on trouve ensuite l'échelle des bandes de glissement, qui sont aperçues dans les nodules α et les joints de grains β. Le fait que leur propagation dans la matrice β transformée soit difficilement observable ne permet pas de conclure sur le rôle de chacune des phases dans la déformation ;
- il y a également l'échelle des ex-grains β. Chacun d'entre eux se déforme de manière assez uniforme et dans des pourcentages très différents les uns des autres. En conséquence, on trouve à cette échelle une hétérogénéité en déformation très marquée ;
- l'échelle macroscopique enfin, la plus facilement accessible, et qui fournira une référence pour les études faites aux échelles inférieures.

Du point de vue de la modélisation numérique, il s'agira donc de savoir à quelles échelles on peut intervenir, et quels sont les mécanismes de déformation que l'on peut prendre en compte.

Chapitre 2

Comportement mécanique et homogénéisation des matériaux hétérogènes

Ce chapitre offre une brève revue des modèles utilisés pour décrire le comportement local des matériaux hétérogènes et des méthodes d'homogénéisation à champs moyens. L'élasticité linéaire est d'abord présentée, puis, dans le contexte des petites déformations, on décrit des lois phénoménologiques aptes à représenter le comportement plastique, dépendant ou non de la vitesse de chargement. Dans la seconde partie du chapitre, on s'intéresse au comportement effectif et à la manière d'"assembler" les comportements locaux. Une revue bibliographique, qui se veut non-exhaustive, permet de présenter le principe d'homogénéisation des matériaux hétérogènes, puis de faire connaître certains modèles, en ne considérant qu'une seule transition d'échelles. Ces modèles de la littérature serviront de base pour le développement dans le chapitre suivant de modèles à deux transitions d'échelles, spécifiquement adaptés aux alliages de titane β-métastable.

2.1 Elasticité

2.1.1 Forme générale de l'élasticité linéaire

En élasticité linéaire, le tenseur des contraintes est linéairement relié au tenseur des déformations par le tenseur d'élasticité, ce qui s'écrit sous forme indicielle :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\ \varepsilon_{kl} \tag{2.1}$$

Grâce aux relations de symétries, les 81 composantes du tenseur d'élasticité peuvent être décrites par 21 constantes indépendantes :

$$\textit{Petite symétrie :} \qquad C_{ijkl} = C_{ijlk} = C_{jikl} \tag{2.2}$$

$$\textit{Grande symétrie :} \qquad C_{ijkl} = C_{klij} \tag{2.3}$$

Pour plus de simplicité dans l'écriture, on utilise la notation de Voigt pour les tenseurs de deuxième et de quatrième ordre symétriques. Les composantes du tenseur d'élasticité, $\underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}$, se

calculent par projection sur les vecteurs élémentaires de la base. Par exemple :

$$C_{12} = (\underset{\sim}{e}_1 \otimes \underset{\sim}{e}_1) : \underset{\approx}{C} : (\underset{\sim}{e}_2 \otimes \underset{\sim}{e}_2) = C_{1122} \tag{2.4}$$

$$C_{14} = C_{41} = (\underset{\sim}{e}_1 \otimes \underset{\sim}{e}_1) : \underset{\approx}{C} : \frac{1}{\sqrt{2}}(\underset{\sim}{e}_2 \otimes \underset{\sim}{e}_3 + \underset{\sim}{e}_3 \otimes \underset{\sim}{e}_2) = \sqrt{2}\, C_{1123} \tag{2.5}$$

$$C_{44} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\underset{\sim}{e}_2 \otimes \underset{\sim}{e}_3 + \underset{\sim}{e}_3 \otimes \underset{\sim}{e}_2) : \underset{\approx}{C} : \frac{1}{\sqrt{2}}(\underset{\sim}{e}_2 \otimes \underset{\sim}{e}_3 + \underset{\sim}{e}_3 \otimes \underset{\sim}{e}_2) = 2\, C_{2323} \tag{2.6}$$

La relation $\underset{\sim}{\sigma} = \underset{\approx}{C} : \underset{\sim}{\varepsilon}$ se détaille donc de la manière suivante :

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sqrt{2}\,\sigma_{23} \\ \sqrt{2}\,\sigma_{31} \\ \sqrt{2}\,\sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & \sqrt{2}\,C_{1123} & \sqrt{2}\,C_{1131} & \sqrt{2}\,C_{1112} \\ C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & \sqrt{2}\,C_{2223} & \sqrt{2}\,C_{2231} & \sqrt{2}\,C_{2212} \\ C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & \sqrt{2}\,C_{3323} & \sqrt{2}\,C_{3331} & \sqrt{2}\,C_{3312} \\ \sqrt{2}\,C_{2311} & \sqrt{2}\,C_{2322} & \sqrt{2}\,C_{2333} & 2\,C_{2323} & 2\,C_{2331} & 2\,C_{2312} \\ \sqrt{2}\,C_{3111} & \sqrt{2}\,C_{3122} & \sqrt{2}\,C_{3133} & 2\,C_{3123} & 2\,C_{3131} & 2\,C_{3112} \\ \sqrt{2}\,C_{1211} & \sqrt{2}\,C_{1222} & \sqrt{2}\,C_{1233} & 2\,C_{1223} & 2\,C_{1231} & 2\,C_{1212} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \sqrt{2}\,\varepsilon_{23} \\ \sqrt{2}\,\varepsilon_{31} \\ \sqrt{2}\,\varepsilon_{12} \end{pmatrix} \tag{2.7}$$

Le nombre de composantes du tenseur d'élasticité peut encore être réduit s'il présente des symétries supplémentaires dues à la structure du matériau. On montre ici trois différentes classes de symétrie qui seront utilisées dans le cadre de notre travail :

Isotrope

$$\begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1122} & C_{1111} & C_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1122} & C_{1122} & C_{1111} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{1111}-C_{1122} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{1111}-C_{1122} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{1111}-C_{1122} \end{pmatrix} \tag{2.8}$$

Cubique

$$\begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1122} & C_{1111} & C_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1122} & C_{1122} & C_{1111} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\,C_{2323} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\,C_{2323} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\,C_{2323} \end{pmatrix} \tag{2.9}$$

Isotrope transverse

$$\begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1122} & C_{1111} & C_{1133} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1133} & C_{1133} & C_{3333} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\,C_{2323} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\,C_{2323} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{1111}-C_{1122} \end{pmatrix} \tag{2.10}$$

2.1.2 Décomposition d'un tenseur d'élasticité isotrope

Un tenseur d'élasticité isotrope ($\underset{\approx}{\Lambda}$) peut également s'écrire en fonction d'un module de cisaillement, μ, et d'un module de compressibilité, k :

$$\underset{\approx}{\Lambda} = 2\mu \underset{\approx}{J} + 3k \underset{\approx}{K} \tag{2.11}$$

où $\underset{\sim}{\underset{\sim}{K}}$ et $\underset{\sim}{\underset{\sim}{J}}$ sont des opérateurs qui transforment respectivement en sa partie sphérique et en sa partie déviatorique tout tenseur $\underset{\sim}{a}$ du second ordre :

$$\underset{\sim}{\underset{\sim}{K}} : \underset{\sim}{a} = \frac{1}{3} Tr(\underset{\sim}{a})\ \underset{\sim}{I} \tag{2.12}$$

$$\underset{\sim}{\underset{\sim}{J}} : \underset{\sim}{a} = dev(\underset{\sim}{a}) = \underset{\sim}{a} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{K}} : \underset{\sim}{a} \tag{2.13}$$

On remarque que :

$$\underset{\sim}{\underset{\sim}{J}} + \underset{\sim}{\underset{\sim}{K}} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{J}} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{J}} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{K}} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{K}} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{I}} \quad \text{et} \quad \underset{\sim}{\underset{\sim}{J}} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{K}} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{K}} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{J}} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{0}} \tag{2.14}$$

Par ailleurs, si on exprime μ et k en fonction du coefficient de Poisson ν et du module d'Young grâce aux tables de correspondance entre modules isotropes données en annexe (E.1), on peut retrouver la loi de Hooke :

$$\underset{\sim}{\underset{\sim}{\Lambda}} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{pmatrix} (1-\nu) & \nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & (1-\nu) & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & \nu & (1-\nu) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (1-2\nu) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & (1-2\nu) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & (1-2\nu) \end{pmatrix} \tag{2.15}$$

2.1.3 Décomposition d'un tenseur d'élasticité cubique

Pour décomposer un tenseur d'élasticité à symétrie cubique, la partie déviatorique doit être traitée en deux parties :

$$\underset{\sim}{\underset{\sim}{C}} = 3k\underset{\sim}{\underset{\sim}{K}} + 2\mu'\underset{\sim}{\underset{\sim}{J'}} + 2\mu''\underset{\sim}{\underset{\sim}{J''}} \tag{2.16}$$

Avec :

$$I_{ijkl} = \frac{1}{2}\left(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}\right) \tag{2.17}$$

$$K_{ijkl} = \frac{1}{3}\delta_{ij}\delta_{kl} \tag{2.18}$$

$$J_{ijkl} = I_{ijkl} - K_{ijkl} = J'_{ijkl} + J''_{ijkl} \tag{2.19}$$

$$J'_{ijkl} = \delta_{pi}\delta_{pj}\delta_{pk}\delta_{pl} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\delta_{kl} \tag{2.20}$$

$$J''_{ijkl} = \frac{1}{2}\left(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}\right) - \delta_{pi}\delta_{pj}\delta_{pk}\delta_{pl} \tag{2.21}$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker des composantes sur i et sur j.

Les trois modules peuvent être identifiés :

$$k = \frac{C_{1111} + 2\ C_{1122}}{3} \qquad \mu' = \frac{C_{1111} - C_{1122}}{2} \qquad \mu'' = C_{2323} \tag{2.22}$$

Le degré d'anisotropie du tenseur d'élasticité cubique peut être évalué grâce au ratio de Zener, qui est le rapport entre les deux modules de cisaillement :

$$\mathcal{Z} = \frac{\mu''}{\mu'} = \frac{2\ C_{2323}}{C_{1111} - C_{1122}} \tag{2.23}$$

Lorsque $\mathcal{Z} = 1$, les modules de cisaillement sont égaux ($\mu = \mu' = \mu''$) et l'élasticité redevient isotrope.

2.2 Plasticité macroscopique

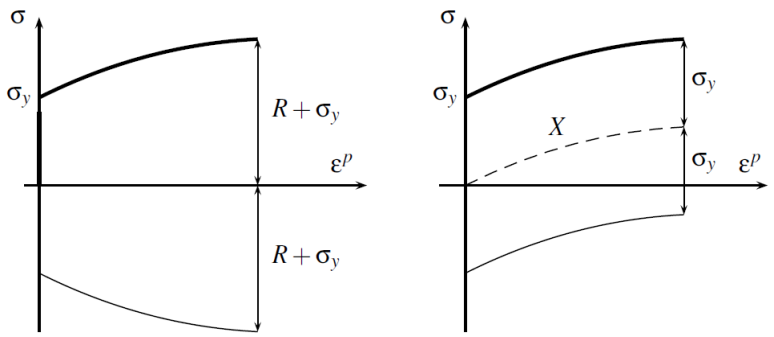
2.2.1 Présentation générale

On distingue le domaine plastique du domaine élastique par l'introduction de la fonction charge f. Dans le cas où la plasticité est indépendante du temps, il existe trois régimes de fonctionnement :

- domaine d'élasticité si $f < 0$
- décharge élastique si $f = 0$ et $\dot{f} < 0$
- écoulement plastique si $f = 0$ et $\dot{f} = 0$

Au cours de la déformation, le domaine élastique sera amené à évoluer si le matériau n'est pas considéré comme plastique parfait :

- L'écrouissage isotrope induit une expansion du domaine d'élasticité en fonction des variables d'écrouissage, tout en restant centré sur l'origine (Fig.2.1.a). L'évolution de ces variables reste la même quel que soit le signe de la vitesse de déformation plastique. Elle s'exprimera donc en fonction de la déformation plastique cumulée.
- L'écrouissage cinématique conduit à une translation du domaine d'élasticité (Fig.2.1.b). Les variables associées sont généralement considérées comme des contraintes internes, tensorielles dans le cas général, et elles sont pilotées par la valeur actuelle de la déformation plastique.



a. Isotrope b. Cinématique

FIGURE 2.1 – Illustration des deux principaux types d'écrouissage. [Besson *et al.*, 2001]

Dans le cas d'un matériau isotrope, f doit être une fonction symétrique des invariants du tenseur des contrainte :

$$I_1 = Tr(\underset{\sim}{\sigma}) = \sigma_{ii} \tag{2.24}$$

$$I_2 = \frac{1}{2}Tr(\underset{\sim}{\sigma}^2) = \frac{1}{2}\sigma_{ij}\sigma_{ji} \tag{2.25}$$

$$I_3 = \frac{1}{3}Tr(\underset{\sim}{\sigma}^3) = \frac{1}{3}\sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{ki} \tag{2.26}$$

Dans le cas où le matériau est indépendant de la pression hydrostatique, cette dernière peut être négligée, ce qui revient à travailler avec le déviateur du tenseur des contraintes $\underset{\sim}{s}$:

$$\underset{\sim}{s} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{J}} : \underset{\sim}{\sigma} \tag{2.27}$$

Les invariants deviennent :

$$J_1 = Tr(\underset{\sim}{s}) = 0$$
$$J_2 = \frac{1}{2} Tr(\underset{\sim}{s}^2) = \frac{1}{2} s_{ij} s_{ji} \tag{2.28}$$
$$J_3 = \frac{1}{3} Tr(\underset{\sim}{s}^3) = \frac{1}{3} s_{ij} s_{jk} s_{ki} \tag{2.29}$$

Mais il est plus pratique d'utiliser l'invariant J plutôt que l'invariant J_2 :

$$J(\underset{\sim}{\sigma}) = \sqrt{\frac{3}{2}\ \underset{\sim}{\sigma} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{J}} : \underset{\sim}{\sigma}\ } = \sqrt{\frac{3}{2} s_{ij} s_{ij}} \tag{2.30}$$

Il reste maintenant à définir les critères tridimensionnels qui conditionnent l'écoulement plastique.

2.2.2 Ecrouissage et fonction de charge

Dans une approche purement phénoménologique, la fonction de charge du critère de von Mises s'écrit en fonction de la contrainte appliquée et d'une ou plusieurs variables d'écrouissage additif [Lemaitre et Chaboche, 1985], de type cinématique ($\underset{\sim}{X}$) et/ou isotrope (R) :

$$f(\underset{\sim}{\sigma}, \underset{\sim}{X}, R) = J(\underset{\sim}{\sigma} - \underset{\sim}{X}) - R \tag{2.31}$$

Ces variables d'écrouissage sont définies par les variables d'état $\underset{\sim}{\alpha}_i$ et r_i :

$$\underset{\sim}{X} = \sum_i \frac{2}{3} C_i \underset{\sim}{\alpha}_i \qquad \text{avec } \dot{\underset{\sim}{\alpha}}_i = \left(\underset{\sim}{n} - D_i \underset{\sim}{\alpha}_i\right) \dot{p} \tag{2.32}$$

$$R = R_0 + \sum_i b_i Q_i r_i \qquad \text{avec } \dot{r}_i = (1 - b_i r_i) \dot{p} \tag{2.33}$$

où $\dot{p}$ est la vitesse de déformation plastique cumulée. Les paramètres C_i sont les pentes initiales dans le plan $\varepsilon^p - \sigma$ définies par chaque variable d'écrouissage cinématique, et D_i les constantes qui règlent les vitesses de saturation associées. Le terme R_0 représente le seuil initial de plasticité, Q_i est une capacité d'écrouissage isotrope et b_i est le coefficient définissant sa saturation. La normale à la surface de charge, $\underset{\sim}{n}$, permet, dans le cas où la règle de normalité est vérifiée, de donner la direction de l'écoulement plastique. Elle peut s'écrire :

$$\underset{\sim}{n} = \frac{\partial f}{\partial \underset{\sim}{\sigma}} = \frac{3}{2} \frac{\underset{\sim}{s} - \underset{\sim}{X}}{J(\underset{\sim}{\sigma} - \underset{\sim}{X})} \tag{2.34}$$

De par sa nature, le critère de von Mises n'est pas en mesure de s'appliquer aux matériaux dont les propriétés sont anisotropes. On pense notamment aux matériaux composites ou aux alliages texturés. Pour représenter cette anisotropie, la solution la plus simple consiste à généraliser le critère de von Mises, en remplaçant l'opérateur $\underset{\sim}{\underset{\sim}{J}}$ dans l'expression de l'invariant

J (2.30) par un tenseur du quatrième ordre anisotrope $\underset{\sim}{\underset{\sim}{\mathcal{H}}}$. Ce critère est plus généralement appelé critère de Hill, il s'écrit donc :

$$f^{\mathcal{H}}(\underset{\sim}{\sigma},\underset{\sim}{X},R) = J^{\mathcal{H}}(\underset{\sim}{\sigma}-\underset{\sim}{X}) - R = \sqrt{\frac{3}{2}\,(\underset{\sim}{\sigma}-\underset{\sim}{X}) : \underset{\sim}{\underset{\sim}{\mathcal{H}}} : (\underset{\sim}{\sigma}-\underset{\sim}{X})} - R \tag{2.35}$$

Pour un matériau orthotrope, le tenseur $\underset{\sim}{\underset{\sim}{\mathcal{H}}}$ peut être réduit à 6 composantes. Il est également possible de travailler avec la partie déviatorique des contraintes. Dans ce cas, un second tenseur $\underset{\sim}{\underset{\sim}{\mathcal{H}}}'$ doit être introduit :

$$f^{\mathcal{H}}(\underset{\sim}{\sigma},\underset{\sim}{X},R) = J^{\mathcal{H}}(\underset{\sim}{s}-\underset{\sim}{X}) - R = \sqrt{\frac{3}{2}\,(\underset{\sim}{s}-\underset{\sim}{X}) : \underset{\sim}{\underset{\sim}{\mathcal{H}}}' : (\underset{\sim}{s}-\underset{\sim}{X})} - R \tag{2.36}$$

le tenseur $\underset{\sim}{\underset{\sim}{\mathcal{H}}}'$ prenant une forme diagonale :

$$\begin{pmatrix} 2\mathcal{H}_1-\mathcal{H}_2+2\mathcal{H}_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2\mathcal{H}_1+2\mathcal{H}_2-\mathcal{H}_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathcal{H}_1+2\mathcal{H}_2+2\mathcal{H}_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\mathcal{H}_4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mathcal{H}_5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mathcal{H}_6 \end{pmatrix} \tag{2.37}$$

La direction d'écoulement s'écrit alors :

$$\underset{\sim}{n} = \frac{\partial f^{\mathcal{H}}}{\partial \underset{\sim}{\sigma}} = \frac{3}{2}\,\frac{\underset{\sim}{\underset{\sim}{\mathcal{H}}}' : (\underset{\sim}{s}-\underset{\sim}{X})}{J^{\mathcal{H}}(\underset{\sim}{\sigma}-\underset{\sim}{X})} \tag{2.38}$$

Dans ce cas, il est à noter que les coefficients scalaires C_i et D_i de l'équation (2.32) peuvent également être remplacés par des tenseurs du quatrième ordre.

Il reste maintenant à décrire comment vont évoluer les déformations lorsque les critères de plasticité font état d'un écoulement plastique. Cette évolution dépendra de la présence ou non de viscosité : les cas élasto-plastique et élasto-viscoplastique seront donc traités séparément par la suite.

2.2.3 Ecoulement plastique

Dans le cas non visqueux, on admet la condition de cohérence $\dot{f} = 0$ qui conduit à :

$$\frac{\partial f}{\partial \underset{\sim}{\sigma}}\dot{\underset{\sim}{\sigma}} + \frac{\partial f}{\partial \underset{\sim}{X}}\dot{\underset{\sim}{X}} + \frac{\partial f}{\partial R}\dot{R} = 0 \tag{2.39}$$

$$\underset{\sim}{n} : \dot{\underset{\sim}{\sigma}} - \dot{\underset{\sim}{X}} : \underset{\sim}{n} - \dot{R} = 0 \tag{2.40}$$

les vitesses $\dot{\underset{\sim}{X}}$ et $\dot{R}$ étant des fonctions de $\dot{p}$, cette dernière peut s'écrire :

$$\dot{p} = \frac{\underset{\sim}{n} : \dot{\underset{\sim}{\sigma}}}{H} \tag{2.41}$$

où H est une constante dépendante des paramètres matériau. Dans le cas où les variables d'écrouissage sont celles définies en (2.32) et (2.33), H s'écrit :

$$H = \sum_i \frac{2}{3} C_i \left(\underset{\sim}{n} - D_i \underset{\sim}{\alpha}_i\right) : \underset{\sim}{n} + \sum_j b_j Q_j (1 - b_j r_j) \tag{2.42}$$

Dans ces conditions, la vitesse de déformation totale peut donc s'écrire :

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}} = \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^e + \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^p = \underset{\sim\sim}{C}^{-1} : \dot{\underset{\sim}{\sigma}} + \dot{p}\ \underset{\sim}{n} \tag{2.43}$$

Il peut également être utile d'évaluer l'opérateur tangent, qui relie la vitesse des contraintes à celle des déformations :

$$\dot{\underset{\sim}{\sigma}} = \underset{\sim\sim}{L} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}} \tag{2.44}$$

Pour cela, l'équation (2.41) doit être reformulée :

$$H\dot{p} = \underset{\sim}{n} : \underset{\sim\sim}{C} : \left(\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}} - \dot{p} : \underset{\sim}{n}\right) \tag{2.45}$$

$$\dot{p} = \frac{\underset{\sim}{n} : \underset{\sim\sim}{C} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}}{H + \underset{\sim}{n} : \underset{\sim\sim}{C} : \underset{\sim}{n}} \tag{2.46}$$

En utilisant cette nouvelle expression de $\dot{p}$ dans la relation d'élasticité $\dot{\underset{\sim}{\sigma}} = \underset{\sim\sim}{C} : \left(\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}} - \dot{p}\underset{\sim}{n}\right)$, on obtient :

$$\underset{\sim\sim}{L} = \underset{\sim\sim}{C} - \frac{\left(\underset{\sim\sim}{C} : \underset{\sim}{n}\right) \otimes \left(\underset{\sim\sim}{C} : \underset{\sim}{n}\right)}{H + \underset{\sim}{n} : \underset{\sim\sim}{C} : \underset{\sim}{n}} \tag{2.47}$$

2.2.4 Ecoulement viscoplastique

Pour décrire la plasticité dans le cas où elle est dépendante du temps, la solution la plus conventionnelle consiste à utiliser une loi puissance, en introduisant les coefficients n et K dans l'expression de la vitesse de déformation viscoplastique cumulée :

$$\dot{p} = \left\langle \frac{f}{K} \right\rangle^n \quad \text{avec } \langle x \rangle = \max(x, 0) \tag{2.48}$$

On va également chercher à exprimer l'opérateur tangent défini en (2.44). Pour cela, il peut être judicieux de s'intéresser dans un premier temps à la dérivée de la vitesse des déformations par la vitesse des contraintes :

$$\frac{\partial \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}}{\partial \dot{\underset{\sim}{\sigma}}} = \frac{\partial \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^e}{\partial \dot{\underset{\sim}{\sigma}}} + \frac{\partial \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^p}{\partial \underset{\sim}{\sigma}} : \frac{\partial \underset{\sim}{\sigma}}{\partial \dot{\underset{\sim}{\sigma}}} \tag{2.49}$$

$$\frac{\partial \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}}{\partial \dot{\underset{\sim}{\sigma}}} = \underset{\sim\sim}{C}^{-1} + \left(\frac{\partial \dot{p}}{\partial f}\frac{\partial f}{\partial \underset{\sim}{\sigma}} \otimes \underset{\sim}{n} + \dot{p}\frac{\partial \underset{\sim}{n}}{\partial \underset{\sim}{\sigma}}\right) : \frac{\partial \underset{\sim}{\sigma}}{\partial \dot{\underset{\sim}{\sigma}}} \tag{2.50}$$

$$\frac{\partial \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}}{\partial \dot{\underset{\sim}{\sigma}}} = \underset{\sim\sim}{C}^{-1} + \left(\frac{n}{K}\left\langle \frac{f}{K} \right\rangle^{n-1} \underset{\sim}{n} \otimes \underset{\sim}{n} + \left\langle \frac{f}{K} \right\rangle^n \frac{\partial \underset{\sim}{n}}{\partial \underset{\sim}{\sigma}}\right) : \frac{\partial \underset{\sim}{\sigma}}{\partial \dot{\underset{\sim}{\sigma}}} \tag{2.51}$$

La dérivée de la normale par rapport à la contrainte correspond au tenseur du quatrième ordre $\underset{\sim\sim}{N}$, lequel s'écrit :

$$\underset{\sim\sim}{N} = \frac{\partial \underset{\sim}{n}}{\partial \underset{\sim}{\sigma}} = \frac{1}{J(\underset{\sim}{\sigma})}\left(\frac{3}{2}\underset{\sim\sim}{J} - \underset{\sim}{n} \otimes \underset{\sim}{n}\right) \tag{2.52}$$

La formulation incrémentale du modèle permet de simplifier la dérivée $\frac{\partial \underset{\sim}{\sigma}}{\partial \dot{\underset{\sim}{\sigma}}}$:

$$\frac{\partial \underset{\sim}{\sigma}}{\partial \dot{\underset{\sim}{\sigma}}} = \frac{\partial (\underset{\sim}{\sigma}(t) + \dot{\underset{\sim}{\sigma}} \Delta t)}{\partial \dot{\underset{\sim}{\sigma}}} = \Delta t \ \underset{\approx}{I} \tag{2.53}$$

On remarque que la taille du pas de temps va donc intervenir dans l'expression de l'opérateur tangent, ce qui est naturel puisque c'est elle qui détermine l'ampleur de l'écoulement viscoplastique pour une vitesse de sollicitation donnée. La forme finale pour l'opérateur tangent viscoplastique est donc :

$$\underset{\approx}{L} = \left[\underset{\approx}{C}^{-1} + \left(\frac{n}{K} \left\langle \frac{f}{K} \right\rangle^{n-1} \underset{\sim}{n} \otimes \underset{\sim}{n} + \left\langle \frac{f}{K} \right\rangle^{n} \underset{\approx}{N} \right) \Delta t \right]^{-1} \tag{2.54}$$

2.3 Plasticité cristalline

2.3.1 Ecrouissage et fonction de charge

Dans le cas d'un monocristal, la déformation produite par un système de glissement peut être accompagnée d'un écrouissage cinématique et isotrope. Le système de glissement s est caractérisé par la normale au plan $\{n\}^s$ et la direction de glissement $\{l\}^s$. Le tenseur d'orientation $\underset{\sim}{m}^s$ permet de projeter la contrainte appliquée dans le repère du système de glissement :

$$\underset{\sim}{m}^s = \frac{1}{2}(\{l\}^s \otimes \{n\}^s + \{n\}^s \otimes \{l\}^s) \tag{2.55}$$

La cission qui s'applique sur un système de glissement est donc calculée de la manière suivante :

$$\tau^s = \underset{\sim}{\sigma} : \underset{\sim}{m}^s \tag{2.56}$$

La fonction de charge correspondant à chaque système de glissement s s'écrit :

$$f^s(\tau^s, x^s, r^s) = \mid \tau^s - x^s \mid - r^s \tag{2.57}$$

Le modèle de plasticité cristalline [Méric *et al.*, 1991], [Méric et Cailletaud, 1991] qui est adopté reprend le formalisme déjà utilisé avec le critère de von Mises. Ainsi, les variables d'écrouissage s'écrivent :

$$x^s = \sum_i c_i \alpha_i^s \qquad \text{avec } \dot{\alpha}_i^s = (\eta^s - d_i \alpha_i^s)\, \dot{v}^s \tag{2.58}$$

$$r^s = \tau_c^s + \sum_i \left[b_i Q_i \sum_r h_{sr} \rho_i^r \right] \qquad \text{avec } \dot{\rho}_i^r = (1 - b_i \rho_i^r) \dot{v}^r \tag{2.59}$$

où $\dot{v}^s$ représente la valeur absolue de la vitesse de glissement sur le système de glissement s. La constante η^s représente le signe de $(\tau^s - x^s)$, et la matrice d'interaction h_{sr} représente d'une part l'auto-écrouissage avec les termes h_{ss}, résultant des interactions entre dislocations d'un même système s, et l'écrouissage latent $h_{sr}(r \neq s)$ qui est issu des interactions entre dislocations de deux systèmes différents.

La vitesse de déformation totale s'écrit alors par sommation sur l'ensemble des systèmes de glissement actifs (N_{syst}^a) :

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}} = \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^e + \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^p = \underset{\approx}{C}^{-1} : \dot{\underset{\sim}{\sigma}} + \sum_{s=1}^{N_{syst}^a} \dot{v}^s \eta^s \ \underset{\sim}{m}^s \tag{2.60}$$

2.3.2 Ecoulement plastique

Il y aura écoulement plastique sur un système de glissement s si la condition de cohérence est vérifiée, soit :

$$\frac{\partial f^s}{\partial \tau^s}\dot{\tau}^s + \frac{\partial f^s}{\partial x^s}\dot{x}^s + \frac{\partial f^s}{\partial r^s}\dot{r}^s = 0 \tag{2.61}$$

$$\eta^s\ \dot{\tau}^s - \eta^s\ \dot{x}^s - \dot{r}^s = 0 \tag{2.62}$$

En poursuivant le développement de l'équation (2.62), on obtient, si les paramètres matériau sont constants :

$$\eta^s\ \dot{\tau}^s - \eta^s \sum_i c_i\ (\eta^s - d_i\alpha_i^s)\dot{\upsilon}^s - \sum_j \left[b_j Q_j \sum^r h_{sr}(1 - b_j\rho_j^r)\dot{\upsilon}^r \right] = 0$$

$$\eta^s\ \underset{\sim}{m}^s : \underset{\approx}{C} : \left(\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}} - \sum^r \eta^r \dot{\upsilon}^r \underset{\sim}{m}^r \right) - \sum_i c_i\ (1 - d_i\eta^s\alpha_i^s)\dot{\upsilon}^s - \sum_j \left[b_j Q_j \sum^r h_{sr}(1 - b_j\rho_j^r)\dot{\upsilon}^r \right] = 0$$

On peut simplifier l'expression précédente, en écrivant pour un système de glissement s :

$$t^s = \sum^r k_{sr}\dot{\upsilon}^r \tag{2.63}$$

avec :

$$t^s = \eta^s \underset{\approx}{C} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}} : \underset{\sim}{m}^s \tag{2.64}$$

$$k_{sr} = \eta^r\eta^s \underset{\sim}{m}^r : \underset{\approx}{C} : \underset{\sim}{m}^s + \sum_i c_i\ (1 - d_i\eta^s\alpha_i^s)\delta_{sr} + \sum_j \left[b_j Q_j h_{sr}(1 - b_j\rho_j^r) \right] \tag{2.65}$$

où δ_{sr} est le symbole de Kronecker. On note dans l'équation (2.65) que si le matériau possède plusieurs familles de systèmes de glissement, les paramètres b_j qui se trouvent dans la parenthèse appartiennent à la famille du système r considéré, tandis que ceux en dehors de la parenthèse sont rattachés à la famille du système s. On s'aperçoit également que la vitesse de déformation cumulée d'un système de glissement dépend de celles des autres systèmes. En conséquence, il faut les calculer simultanément en posant un système à N^a_{syst} équations pour N^a_{syst} inconnus :

$$\{\dot{\upsilon}\} = [\mathbf{k}]^{-1}\ :\ \{t\} \tag{2.66}$$

où $\{\dot{\upsilon}\}$ est un vecteur représentant toutes les vitesses de déformation plastique cumulée non-nulles, $[\mathbf{k}]$ est une matrice carrée de taille N^a_{syst}xN^a_{syst}, réunissant notamment toutes les interactions entre systèmes, et $\{t\}$ est un vecteur rassemblant les termes t^s.

La résolution de ce système d'équations permet donc d'évaluer les valeurs de $\dot{\upsilon}^s$ pour tous les systèmes actifs. La condition à respecter est que toutes ces vitesses soient positives. S'il s'avère que la résolution du système d'équations conduit à plusieurs solutions, alors le choix se portera sur celle qui maximise la dissipation intrinsèque, c'est-à-dire la différence entre la puissance plastique et l'énergie stockée dans le matériau lorsqu'il s'écrouit. Pour les variables d'écrouissage définies dans le cadre de notre travail, elle s'écrit :

$$\phi_1 = \underset{\sim}{\sigma} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^p - \sum_s \left[\sum_i x_i^s\dot{\alpha}_i^s + \sum_j r_j^s\dot{\rho}_j^s \right] \tag{2.67}$$

Du fait de l'interdépendance des vitesses de déformation plastique cumulée, le calcul de l'opérateur tangent s'avère délicat. En première approche, on peut s'en affranchir en prenant

un écrouissage isotrope avec une matrice d'interaction diagonale. A partir de la condition de cohérence (2.62), on obtient :

$$\dot{v}^s = \frac{\eta^s \ \dot{\tau}^s}{h^s} \tag{2.68}$$

avec :

$$h^s = \sum_i c_i \ (1 - d_i \eta^s \alpha_i^s) + \sum_j b_j Q_j h_{ss} (1 - b_j \rho_j^s) \tag{2.69}$$

Et en employant la relation d'élasticité :

$$\dot{\underset{\sim}{\sigma}} = \underset{\sim\sim}{C} : \left(\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}} - \sum_s \dot{v}^s \eta^s \ \underset{\sim}{m}^s \right) = \underset{\sim\sim}{C} : \left(\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}} - \sum_s \frac{\eta^s \ \dot{\underset{\sim}{\sigma}} : \underset{\sim}{m}^s}{h^s} \eta^s \underset{\sim}{m}^s \right) \tag{2.70}$$

on déduit l'expression de l'opérateur tangent :

$$\underset{\sim\sim}{L} = \left(\underset{\sim\sim}{C}^{-1} + \sum_s \frac{1}{h^s} \ \underset{\sim}{m}^s \otimes \underset{\sim}{m}^s \right)^{-1} \tag{2.71}$$

En considérant à présent toutes les variables d'écrouissage, on peut écrire en considérant dans l'équation (2.66) que $[\mathbf{p}]$ est la matrice inverse de $[\mathbf{k}]$:

$$\dot{\underset{\sim}{\sigma}} = \underset{\sim\sim}{C} : \left(\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}} - \sum_s \left[\sum_r p_{sr} \ \eta^r \ \underset{\sim\sim}{C} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}} : \underset{\sim}{m}^r \right] : \underset{\sim}{m}^s \eta^s \right) \tag{2.72}$$

ce qui donne l'opérateur tangent suivant :

$$\underset{\sim\sim}{L} = \underset{\sim\sim}{C} - \sum_s \sum_r \eta^s \eta^r p_{sr} \ \left(\underset{\sim\sim}{C} : \underset{\sim}{m}^s \right) \otimes \left(\underset{\sim\sim}{C} : \underset{\sim}{m}^r \right) \tag{2.73}$$

2.3.3 Ecoulement viscoplastique

La viscosité peut être modélisée par une loi puissance :

$$\dot{v}^s = \left\langle \frac{f^s}{K} \right\rangle^n \tag{2.74}$$

Pour l'opérateur tangent, on peut suivre le même raisonnement que dans le cas du critère de von Mises, et obtenir une expression finale qui sera également dépendante de la taille du pas de temps Δt :

$$\frac{\partial \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}}{\partial \dot{\underset{\sim}{\sigma}}} = \underset{\sim\sim}{C}^{-1} + \left(\sum_s \eta^s \frac{\partial \dot{v}^s}{\partial \underset{\sim}{\sigma}} \otimes \underset{\sim}{m}^s \right) : \frac{\partial \underset{\sim}{\sigma}}{\partial \dot{\underset{\sim}{\sigma}}}$$

$$\frac{\partial \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}}{\partial \dot{\underset{\sim}{\sigma}}} = \underset{\sim\sim}{C}^{-1} + \left(\sum_s \eta^s \frac{\partial \dot{v}^s}{\partial f^p} \frac{\partial f^p}{\partial \tau^q} \frac{\partial \tau^q}{\partial \underset{\sim}{\sigma}} \otimes \underset{\sim}{m}^s \right) : \frac{\partial \underset{\sim}{\sigma}}{\partial \dot{\underset{\sim}{\sigma}}}$$

$$\underset{\sim\sim}{L} = \left[\frac{\partial \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}}{\partial \dot{\underset{\sim}{\sigma}}} \right]^{-1} = \left[\ \underset{\sim\sim}{C}^{-1} + \left(\sum_s \frac{n}{K} \left\langle \frac{f^s}{K} \right\rangle^{n-1} \underset{\sim}{m}^s \otimes \underset{\sim}{m}^s \right) \Delta t \ \right]^{-1} \tag{2.75}$$

2.4 Composantes de la matrice jacobienne

On a reporté en annexe C la description des méthodes numériques d'intégration classique, explicite et implicite. Dans ce dernier cas, la méthode itérative de Newton est utilisée pour résoudre le système d'équations non-linéaires imposé par la formulation implicite. Il faut alors fournir à l'algorithme les composantes de la matrice jacobienne.

2.4.1 Critère de von Mises

Pour le critère de von Mises tel que nous l'avons défini en section 2.2.2, les variables à intégrer sont p, $\underset{\sim}{\varepsilon}^e$, $\underset{\sim}{\alpha}$ et r. La matrice jacobienne est donc construite par blocs (4x4), pour lesquels on va définir à chaque fois la forme des dérivées partielles.

$$\bullet\ \underset{\sim}{\mathfrak{R}}_e = \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e + \Delta p\ \underset{\sim}{n} - \Delta\underset{\sim}{\varepsilon} \tag{2.76}$$

$$\frac{\partial \underset{\sim}{\mathfrak{R}}_e}{\partial \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e} = \underset{\approx}{I} + \Delta p \frac{\partial \underset{\sim}{n}}{\partial \underset{\sim}{\sigma}} : \frac{\partial \underset{\sim}{\sigma}}{\partial \underset{\sim}{\varepsilon}^e} : \frac{\partial \underset{\sim}{\varepsilon}^e}{\partial \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e} = \underset{\approx}{I} + \theta \Delta p \underset{\approx}{N} : \underset{\approx}{C} \tag{2.77}$$

$$\frac{\partial \underset{\sim}{\mathfrak{R}}_e}{\partial \Delta p} = \underset{\sim}{n} \tag{2.78}$$

$$\frac{\partial \underset{\sim}{\mathfrak{R}}_e}{\partial \Delta\underset{\sim}{\alpha}} = \frac{\partial \left(\Delta p \underset{\sim}{n}\right)}{\partial \Delta\underset{\sim}{\alpha}} = \frac{2}{3} C \Delta p \frac{\partial \underset{\sim}{n}}{\partial \underset{\sim}{X}} : \frac{\partial \underset{\sim}{X}}{\partial \Delta\underset{\sim}{X}} = -\frac{2}{3} C \theta \Delta p \underset{\approx}{N} \tag{2.79}$$

$$\frac{\partial \underset{\sim}{\mathfrak{R}}_e}{\partial \Delta r} = \underset{\sim}{0} \tag{2.80}$$

$$\bullet\ \mathfrak{R}_p = f(\underset{\sim}{\sigma}, \underset{\sim}{X}, R) \quad \text{(Plasticité)} \tag{2.81}$$

$$\frac{\partial \mathfrak{R}_p}{\partial \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e} = \frac{\partial f}{\partial \underset{\sim}{\sigma}} : \frac{\partial \underset{\sim}{\sigma}}{\partial \underset{\sim}{\varepsilon}^e} : \frac{\partial \underset{\sim}{\varepsilon}^e}{\partial \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e} = \underset{\sim}{n} : \underset{\approx}{C}\theta \tag{2.82}$$

$$\frac{\partial \mathfrak{R}_p}{\partial \Delta p} = 1 \tag{2.83}$$

$$\frac{\partial \mathfrak{R}_p}{\partial \Delta\underset{\sim}{\alpha}} = \frac{2}{3} C \frac{\partial f}{\partial \underset{\sim}{X}} : \frac{\partial \underset{\sim}{X}}{\partial \Delta\underset{\sim}{X}} = \frac{2}{3} C \theta \underset{\sim}{n} \tag{2.84}$$

$$\frac{\partial \mathfrak{R}_p}{\partial \Delta r} = -\frac{\partial f}{\partial R} : \frac{\partial R}{\partial r} : \frac{\partial r}{\partial \Delta r} = bQ \tag{2.85}$$

$$\bullet\ \mathfrak{R}_p = \Delta p - \dot{p}\Delta t \quad \text{(Viscoplasticité)} \tag{2.86}$$

$$\frac{\partial \mathfrak{R}_p}{\partial \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e} = -\frac{\partial \dot{p}}{\partial f} : \frac{\partial f}{\partial \underset{\sim}{\sigma}} : \frac{\partial \underset{\sim}{\sigma}}{\partial \underset{\sim}{\varepsilon}^e} : \frac{\partial \underset{\sim}{\varepsilon}^e}{\partial \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e} = -\theta \frac{n}{K} \left\langle \frac{f}{K} \right\rangle^{n-1} \underset{\sim}{n} : \underset{\approx}{C}\ \Delta t \tag{2.87}$$

$$\frac{\partial \mathfrak{R}_p}{\partial \Delta p} = 1 \tag{2.88}$$

$$\frac{\partial \mathfrak{R}_p}{\partial \Delta\underset{\sim}{\alpha}} = -\frac{\partial \dot{p}}{\partial \Delta\underset{\sim}{\alpha}} = -\frac{2}{3} C \frac{\partial \dot{p}}{\partial f} : \frac{\partial f}{\partial \underset{\sim}{X}} : \frac{\partial \underset{\sim}{X}}{\partial \Delta\underset{\sim}{X}} = \frac{2}{3} C \theta \frac{n}{K} \left\langle \frac{f}{K} \right\rangle^{n-1} \underset{\sim}{n}\ \Delta t \tag{2.89}$$

$$\frac{\partial \mathfrak{R}_p}{\partial \Delta r} = -\frac{\partial \dot{p}}{\partial \Delta r} = -\frac{\partial \dot{p}}{\partial f} : \frac{\partial f}{\partial R} : \frac{\partial R}{\partial r} : \frac{\partial r}{\partial \Delta r} = bQ\theta \frac{n}{K} \left\langle \frac{f}{K} \right\rangle^{n-1} \Delta t \tag{2.90}$$

$$\bullet\ \underset{\sim}{\mathfrak{R}}_\alpha = \Delta\underset{\sim}{\alpha} - \dot{\underset{\sim}{\alpha}}\Delta t = \Delta\underset{\sim}{\alpha} - \left(\underset{\sim}{n} - D\underset{\sim}{\alpha}\right)\Delta p \tag{2.91}$$

$$\frac{\partial \underset{\sim}{\mathfrak{R}}_\alpha}{\partial \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e} = -\Delta p \frac{\partial \underset{\sim}{n}}{\partial \underset{\sim}{\sigma}} : \frac{\partial \underset{\sim}{\sigma}}{\partial \underset{\sim}{\varepsilon}^e} : \frac{\partial \underset{\sim}{\varepsilon}^e}{\partial \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e} = -\theta \Delta p \underset{\approx}{N} : \underset{\approx}{C} \tag{2.92}$$

$$\frac{\partial \underset{\sim}{\mathfrak{R}}_\alpha}{\partial \Delta p} = -\underset{\sim}{n} + D\underset{\sim}{\alpha} \tag{2.93}$$

$$\frac{\partial \underset{\sim}{\mathfrak{R}}_\alpha}{\partial \Delta \underset{\sim}{\alpha}} = \underset{\approx}{I} - \frac{2}{3}C\frac{\partial \underset{\sim}{n}}{\partial \underset{\sim}{X}} : \frac{\partial \underset{\sim}{X}}{\partial \Delta \underset{\sim}{X}}\Delta p + D\frac{\partial \underset{\sim}{\alpha}}{\partial \underset{\sim}{\alpha}} : \frac{\partial \underset{\sim}{\alpha}}{\partial \Delta \underset{\sim}{\alpha}}\Delta p = \underset{\approx}{I} + \left(\frac{2}{3}C\underset{\approx}{N} + D\underset{\approx}{I}\right)\theta \Delta p \tag{2.94}$$

$$\bullet\ \mathfrak{R}_r = \Delta r - \dot{r}\Delta t = \Delta r - (1 - br)\Delta p \tag{2.95}$$

$$\frac{\partial \mathfrak{R}_r}{\partial \Delta \underset{\sim}{\varepsilon}^e} = \underset{\sim}{0} \tag{2.96}$$

$$\frac{\partial \mathfrak{R}_r}{\partial \Delta p} = br - 1 \tag{2.97}$$

$$\frac{\partial \mathfrak{R}_r}{\partial \Delta \underset{\sim}{\alpha}} = \underset{\sim}{0} \tag{2.98}$$

$$\frac{\partial \mathfrak{R}_r}{\partial \Delta r} = 1 + b\Delta p\frac{\partial r}{\partial r} : \frac{\partial r}{\partial \Delta r} = 1 + b\theta \Delta p \tag{2.99}$$

2.4.2 Critère de plasticité cristalline

En plasticité cristalline, le nombre de variables à intégrer est beaucoup plus important : on compte la déformation élastique $\underset{\sim}{\varepsilon}^e$ et les trois variables v^s, α^s et ρ^s, qui sont à considérer pour chaque système de glissement.

$$\bullet\ \underset{\sim}{\mathfrak{R}}_e = \Delta \underset{\sim}{\varepsilon}^e + \sum_s \Delta v^s \eta^s \underset{\sim}{m}^s - \Delta \underset{\sim}{\varepsilon} \tag{2.100}$$

$$\frac{\partial \underset{\sim}{\mathfrak{R}}_e}{\partial \Delta \underset{\sim}{\varepsilon}^e} = \underset{\approx}{I} \tag{2.101}$$

$$\frac{\partial \underset{\sim}{\mathfrak{R}}_e}{\partial \Delta v^r} = \eta^r \underset{\sim}{m}^r \tag{2.102}$$

$$\frac{\partial \underset{\sim}{\mathfrak{R}}_e}{\partial \Delta \alpha^r} = \underset{\sim}{0} \tag{2.103}$$

$$\frac{\partial \underset{\sim}{\mathfrak{R}}_e}{\partial \Delta \rho^r} = \underset{\sim}{0} \tag{2.104}$$

$$\bullet\ \mathfrak{R}^s_v = f^s(\tau^s, x^s, r^s) \quad \text{(Plasticité)} \tag{2.105}$$

$$\frac{\partial \mathfrak{R}^s_v}{\partial \Delta \underset{\sim}{\varepsilon}^e} = \frac{\partial f^s}{\partial \tau^s} : \frac{\partial \tau^s}{\partial \underset{\sim}{\sigma}} : \frac{\partial \underset{\sim}{\sigma}}{\partial \underset{\sim}{\varepsilon}^e} : \frac{\partial \underset{\sim}{\varepsilon}^e}{\partial \Delta \underset{\sim}{\varepsilon}^e} = \eta^s \theta\ \underset{\sim}{m}^s : \underset{\approx}{C} \tag{2.106}$$

$$\frac{\partial \mathfrak{R}^s_v}{\partial \Delta v^r} = \delta_{sr} \tag{2.107}$$

$$\frac{\partial \mathfrak{R}^s_v}{\partial \Delta \alpha^r} = \frac{\partial f^s}{\partial x^p} : \frac{\partial x^p}{\partial \alpha^q} : \frac{\partial \alpha^q}{\partial \Delta \alpha^r} = -c\theta \eta^s \delta_{sr} \tag{2.108}$$

$$\frac{\partial \mathfrak{R}^s_v}{\partial \Delta \rho^r} = \frac{\partial f^s}{\partial r^p} : \frac{\partial r^p}{\partial \rho^q} : \frac{\partial \rho^q}{\partial \Delta \rho^r} = -b\theta Q h_{rs} \tag{2.109}$$

$$\bullet\, \Re_{\upsilon}^{s} = \Delta\upsilon^{s} - \dot{\upsilon}^{s}\Delta t \quad \text{(Viscoplasticité)} \tag{2.110}$$

$$\frac{\partial \Re_{\upsilon}^{s}}{\partial \Delta \underset{\sim}{\varepsilon}^{e}} = -\frac{\partial \dot{\upsilon}^{s}}{\partial f^{s}} : \frac{\partial f^{s}}{\partial \tau^{s}} : \frac{\partial \tau^{s}}{\partial \underset{\sim}{\sigma}} : \frac{\partial \underset{\sim}{\sigma}}{\partial \underset{\sim}{\varepsilon}^{e}} : \frac{\partial \underset{\sim}{\varepsilon}^{e}}{\partial \Delta \underset{\sim}{\varepsilon}^{e}}\ \Delta t = -\theta \frac{n}{K} \left\langle \frac{f^{s}}{K} \right\rangle^{n-1} \eta^{s}\ \underset{\sim}{m}^{s} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}\ \Delta t \tag{2.111}$$

$$\frac{\partial \Re_{\upsilon}^{s}}{\partial \Delta \upsilon^{r}} = \delta_{sr} \tag{2.112}$$

$$\frac{\partial \Re_{\upsilon}^{s}}{\partial \Delta \alpha^{r}} = -\frac{\partial \dot{\upsilon}^{s}}{\partial f^{m}} : \frac{\partial f^{m}}{\partial x^{p}} : \frac{\partial x^{p}}{\partial \alpha^{q}} : \frac{\partial \alpha^{q}}{\partial \Delta \alpha^{r}} \Delta t = c\theta \frac{n}{K} \left\langle \frac{f^{s}}{K} \right\rangle^{n-1} \eta^{r} \Delta t\ \ \delta_{sr} \tag{2.113}$$

$$\frac{\partial \Re_{\upsilon}^{s}}{\partial \Delta \rho^{r}} = -\frac{\partial \dot{\upsilon}^{s}}{\partial f^{m}} : \frac{\partial f^{m}}{\partial r^{p}} : \frac{\partial r^{p}}{\partial \rho^{q}} : \frac{\partial \rho^{q}}{\partial \Delta \rho^{r}} \Delta t = b\theta Q h_{sr} \frac{n}{K} \left\langle \frac{f^{s}}{K} \right\rangle^{n-1} \Delta t \tag{2.114}$$

$$\bullet\, \Re_{\alpha}^{s} = \Delta\alpha^{s} - \dot{\alpha}^{s}\Delta t = \Delta\alpha^{s} - (\eta^{s} - d\alpha^{s})\Delta\upsilon^{s} \tag{2.115}$$

$$\frac{\partial \Re_{\alpha}^{s}}{\partial \Delta \underset{\sim}{\varepsilon}^{e}} = \underset{\sim}{0} \tag{2.116}$$

$$\frac{\partial \Re_{\alpha}^{s}}{\partial \Delta \upsilon^{r}} = (d\alpha^{s} - \eta^{s})\delta_{sr} \tag{2.117}$$

$$\frac{\partial \Re_{\alpha}^{s}}{\partial \Delta \alpha^{r}} = (1 + d\theta\Delta\upsilon^{s})\, \delta_{sr} \tag{2.118}$$

$$\frac{\partial \Re_{\alpha}^{s}}{\partial \Delta \rho^{r}} = 0 \tag{2.119}$$

$$\bullet\, \Re_{\rho}^{s} = \Delta\rho^{s} - \dot{\rho}^{s}\Delta t = \Delta\rho^{s} - (1 - b\rho^{s})\Delta\upsilon^{s} \tag{2.120}$$

$$\frac{\partial \Re_{\rho}^{s}}{\partial \Delta \underset{\sim}{\varepsilon}^{e}} = \underset{\sim}{0} \tag{2.121}$$

$$\frac{\partial \Re_{\rho}^{s}}{\partial \Delta \upsilon^{r}} = (b\rho^{s} - 1)\delta_{sr} \tag{2.122}$$

$$\frac{\partial \Re_{\rho}^{s}}{\partial \Delta \alpha^{r}} = 0 \tag{2.123}$$

$$\frac{\partial \Re_{\rho}^{s}}{\partial \Delta \rho^{r}} = (1 + b\theta\Delta\upsilon^{s})\, \delta_{sr} \tag{2.124}$$

2.5 Lois de transition d'échelles

Lorsqu'on s'intéresse aux différentes échelles d'un matériau, on doit considérer ses hétérogénéités de structure et de propriété. Le matériau doit donc être discrétisé en une collection de domaines représentatifs, ou "phases" (I), qui posséderont un comportement local spécifique (en raison de la chimie ou de l'orientation cristallographique par exemple). Le "volume élémentaire représentatif" du matériau (VER) devra contenir par définition un nombre suffisant de sous-domaines de façon à ce que les propriétés homogénéisées soient indépendantes de la réalisation.
La géométrie du VER peut être explicitement représentée, en résolvant par la suite le problème à l'aide de méthodes Eléments Finis ou FFT, mais cela peut se révéler très coûteux en temps de calcul et parfois inadapté au problème, notamment si la morphologie des phases est très complexe. Il peut donc être judicieux d'adopter des modèles micro-mécaniques plus grossiers, dits à "champs moyens", le VER nous donnant dans ce cas une réponse macroscopique obtenue par "homogénéisation" des comportements non-linéaires attribués aux différents constituants.
Dans ce contexte, les modèles les plus élémentaires sont basés sur des lois de mélange [Voigt, 1887], [Reuss, 1929], [Tamura *et al.*, 1973]. Mais des solutions plus complètes d'un point de vue théorique sont aussi très répandues.

Dans un modèle à champs moyens la résolution passe par trois étapes essentielles, localisation, application de la loi de comportement local, homogénéisation. On peut trouver ainsi les étapes suivantes :

1. localisation des contraintes : les contraintes locales dans chaque phase sont calculées à partir de la contrainte globale imposée ($\underset{\sim}{\Sigma}$) ;
2. calcul des déformations locales ;
3. homogénéisation des déformations : la réponse en déformation globale est reconstruite à partir des déformations locales.

Les relations entre les différentes échelles se font au travers de tenseurs de transition d'échelles qui peuvent être de localisation ou bien d'accommodation. Pour relier une variable quelconque $\underset{\sim}{X}$ à ses variables locales équivalentes $\underset{\sim}{x}_{\mathrm{I}}$, on peut écrire :

- Localisation : $\underset{\sim}{x}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_{\mathrm{I}} : \underset{\sim}{X}$ (2.125)
- Accommodation : $\underset{\sim}{x}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{X} + \underset{\sim}{\mathcal{K}}_{\mathrm{I}}$ (2.126)

Les lois de concentration, qui permettent de localiser les contraintes, sont construites à partir d'un tenseur d'accommodation.

2.5.1 Premiers travaux

Les premiers travaux visant à représenter la plasticité dans les polycristaux à l'aide de modèles à champs moyens ont été menés par Sachs [Sachs, 1928] et Taylor [Taylor, 1938]. Dans le modèle de Sachs, et dans sa version statique [Batdorf et Budianski, 1949][Zaoui, 1970], on considère que la contrainte au sein de l'agrégat polycristallin est uniforme, autrement dit que si $\underset{\sim}{\sigma}_{\mathrm{I}}$ est la contrainte au sein de la phase I, on peut écrire $\underset{\sim}{\sigma}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{\Sigma}$. Ce modèle fournit une limite inférieure de l'écrouissage ("lower bound model"). Il a été adapté par la suite pour les grandes déformations viscoplastiques et élasto-viscoplastiques [Ahzi *et al.*, 1993].
Taylor, quant à lui, propose de faire l'hypothèse d'une déformation plastique uniforme

($\underset{\sim}{\varepsilon}^p_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{E}^p$). Cette hypothèse conduit à surestimer l'écrouissage du polycristal ("upper bound model"). Ce modèle fut d'abord étendu aux déformations élasto-plastiques ($\underset{\sim}{\varepsilon}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{E}$) par Lin [Lin, 1957], ce qui donna lieu à la loi de concentration de Lin-Taylor dans le cas d'une élasticité homogène et isotrope :

$$\underset{\sim}{\sigma}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{\Sigma} + 2\mu(\underset{\sim}{E}^p - \underset{\sim}{\varepsilon}^p_{\mathrm{I}}) \tag{2.127}$$

Il fut ensuite adapté au cas des déformations viscoplastiques [Hutchinson, 1966], ainsi qu'aux grandes déformations viscoplastiques [Asaro et Needleman, 1985].

Ces deux modèles ne tiennent donc pas compte correctement de l'hétérogénéité en déformation à l'intérieur du polycristal. Bien qu'il soit assez courant de négliger l'hétérogénéité intragranulaire en plasticité cristalline, il est souvent nécessaire de prendre en compte les interactions entre les grains. Pour cela, on peut utiliser des modèles tels que celui de Mori-Tanaka [Mori et Tanaka, 1973] et le modèle "bridging" [Huang, 2004], ou bien les modèles dits auto-cohérents. Ces deux familles de modèles micro-mécaniques sont basées sur le problème d'Eshelby [Eshelby, 1957], qui décrit l'état de contrainte d'une inclusion (I) siège d'une déformation libre $\underset{\sim}{\varepsilon}^L$, se trouvant dans un milieu homogène équivalent (HEM), possédant une déformation libre $\underset{\sim}{E}^L$ et soumis à l'infini à un déplacement $\underset{\sim}{u}(x) = \underset{\sim}{E}x$ (cf. Annexe D). La résolution du problème d'Eshelby montre que la déformation au sein de l'inclusion, $\underset{\sim}{\varepsilon}_{\mathrm{I}}$, et celle de la matrice à l'infini, $\underset{\sim}{E}$, sont homogènes et linéairement dépendantes des déformations libres associées, au travers du tenseur d'Eshelby $\underset{\approx}{S}$:

$$\underset{\sim}{\varepsilon}_{\mathrm{I}} = \underset{\approx}{S} : \underset{\sim}{\varepsilon}^L \tag{2.128}$$

$$\underset{\sim}{E} = \underset{\approx}{S} : \underset{\sim}{E}^L \tag{2.129}$$

Dans le cas où l'élasticité est uniforme, on peut écrire :

$$\underset{\sim}{\sigma}_{\mathrm{I}} = \underset{\approx}{C} : (\underset{\sim}{\varepsilon}_{\mathrm{I}} - \underset{\sim}{\varepsilon}^L) = \underset{\approx}{C} : \left(\underset{\approx}{S} - \underset{\approx}{I}\right) : \underset{\sim}{\varepsilon}^L \tag{2.130}$$

$$\underset{\sim}{\Sigma} = \underset{\approx}{C} : (\underset{\sim}{E} - \underset{\sim}{E}^L) = \underset{\approx}{C} : \left(\underset{\approx}{S} - \underset{\approx}{I}\right) : \underset{\sim}{E}^L \tag{2.131}$$

On en déduit la loi de concentration suivante :

$$\underset{\sim}{\sigma}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{\Sigma} + \underset{\approx}{L}^{\dagger} : (\underset{\sim}{E}^L - \underset{\sim}{\varepsilon}^L) \qquad \text{avec} \qquad \underset{\approx}{L}^{\dagger} = \underset{\approx}{C} : \left(\underset{\approx}{I} - \underset{\approx}{S}\right) \tag{2.132}$$

Les modèles de type Mori-Tanaka vont chercher à relier les moyennes en déformation de l'inclusion et de la matrice. Les modèles auto-cohérents, proposés à l'origine par [Hershey, 1954] et [Kröner, 1958], garantissent que les moyennes calculées à partir des contraintes et des déformations locales sont bien égales aux valeurs macroscopiques. Si f_{I} est la fraction volumique représentative d'une phase I, il vient donc :

$$\underset{\sim}{E} = \langle \underset{\sim}{\varepsilon}_{\mathrm{I}} \rangle = \sum_i f_{\mathrm{I}} \ \underset{\sim}{\varepsilon}_{\mathrm{I}} \tag{2.133}$$

$$\underset{\sim}{\Sigma} = \langle \underset{\sim}{\sigma}_{\mathrm{I}} \rangle = \sum_i f_{\mathrm{I}} \ \underset{\sim}{\sigma}_{\mathrm{I}} \tag{2.134}$$

Ainsi, quelle que soit la loi de concentration découlant de l'équation (2.132), la moyenne

auto-cohérente des contraintes impliquera implicitement celle des déformations :

$$\left\langle \underset{\sim}{\sigma}_{\mathrm{I}} \right\rangle = \underset{\sim}{\Sigma} + \left\langle \underset{\approx}{L}^{\dagger} : \left(\underset{\sim}{E}^{L} - \underset{\sim}{\varepsilon}^{L} \right) \right\rangle \tag{2.135}$$

$$\left\langle \underset{\approx}{L}^{\dagger} : \left(\underset{\sim}{E}^{L} - \underset{\sim}{\varepsilon}^{L} \right) \right\rangle = \underset{\sim}{0} \tag{2.136}$$

$$\underset{\sim}{E}^{L} - \left\langle \underset{\sim}{\varepsilon}^{L} \right\rangle = \underset{\sim}{0} \tag{2.137}$$

L'auto-cohérence implique également les égalités suivantes pour la moyenne des tenseurs de localisation $\underset{\approx}{A}_{\mathrm{I}}$ (2.125) et des tenseurs d'accommodation $\underset{\approx}{\mathcal{K}}_{\mathrm{I}}$ (2.126) :

$$\left\langle \underset{\approx}{A}_{\mathrm{I}} \right\rangle = \underset{\approx}{I} \tag{2.138}$$

$$\left\langle \underset{\approx}{\mathcal{K}}_{\mathrm{I}} \right\rangle = \underset{\approx}{0} \tag{2.139}$$

2.5.2 Schéma auto-cohérent de Hill en élasto-plasticité

Pour décrire le comportement élasto-plastique d'un matériau composé de phases possédant une même morphologie, Hill [Hill, 1965] propose d'appliquer le problème d'Eshelby : chaque phase est alors considérée comme une inclusion ellipsoïdale élasto-plastique, et la matière qui l'entoure représente le milieu homogène équivalent (HEM), soumis à l'infini à une déformation uniforme élasto-plastique. Le problème est alors plus complexe que dans le paragraphe précédent, car on ne peut plus parler de déformation libre étant donné que la déformation plastique dépend de l'évolution de la contrainte.

Dans le cas général de l'élasticité hétérogène et anisotrope, le comportement local de chaque phase I s'écrit en termes de vitesse sous la forme linéaire suivante :

$$\dot{\underset{\sim}{\sigma}}_{\mathrm{I}} = \underset{\approx}{L}_{\mathrm{I}} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} \tag{2.140}$$

où $\underset{\approx}{L}_{\mathrm{I}}$ représente l'opérateur tangent local (cf. 2.2.2 et 2.3). À l'échelle macroscopique, c'est le tenseur uniforme des modules instantanés, $\underset{\approx}{L}^{eff}$, qui permet de relier les vitesses de contrainte et de déformation :

$$\dot{\underset{\sim}{\Sigma}} = \underset{\approx}{L}^{eff} : \dot{\underset{\sim}{E}} \tag{2.141}$$

Dans le cas d'un agrégat polycristallin équiaxe par exemple, le problème peut être représenté par la figure suivante (Fig.2.2).

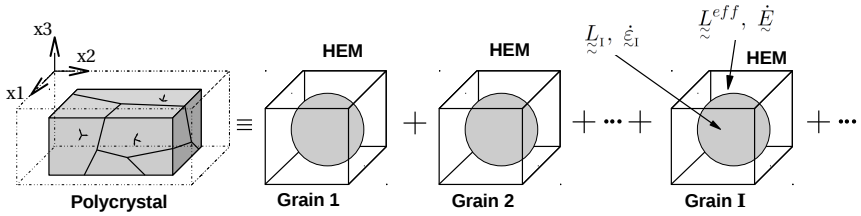


FIGURE 2.2 – Illustration du schéma auto-cohérent de Hill dans le cas d'un agrégat équiaxe.

Pour trouver la loi de concentration, une analogie avec l'approche purement élastique de [François *et al.*, 1991] est proposée. La vitesse de déformation dans chaque phase s'écrit

alors :

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} = \dot{\underset{\sim}{E}} + \underset{\sim}{\underset{\sim}{S}} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{L} \tag{2.142}$$

Et l'équation (2.130) du problème d'Eshelby devient :

$$\dot{\underset{\sim}{\sigma}}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{eff} : \left(\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} - \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{L}\right) \tag{2.143}$$

En introduisant l'expression de $\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{L}$, déduite de l'équation (2.142), dans l'équation précédente, la loi de concentration du modèle de Hill peut être déduite :

$$\dot{\underset{\sim}{\sigma}}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{eff} : \left[\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{S}}^{-1} \left(\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} - \dot{\underset{\sim}{E}}\right)\right] \tag{2.144}$$

$$\dot{\underset{\sim}{\sigma}}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{eff} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{S}}^{-1} : \dot{\underset{\sim}{E}} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{eff} : \left(\underset{\sim}{\underset{\sim}{S}}^{-1} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{I}}\right) : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} \tag{2.145}$$

$$\dot{\underset{\sim}{\sigma}}_{\mathrm{I}} - \dot{\underset{\sim}{\Sigma}} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{eff} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{S}}^{-1} : \dot{\underset{\sim}{E}} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{eff} : \left(\underset{\sim}{\underset{\sim}{S}}^{-1} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{I}}\right) : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{eff} : \dot{\underset{\sim}{E}} \tag{2.146}$$

$$\dot{\underset{\sim}{\sigma}}_{\mathrm{I}} = \dot{\underset{\sim}{\Sigma}} + \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{eff} : \left(\underset{\sim}{\underset{\sim}{S}}^{-1} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{I}}\right) : \left(\dot{\underset{\sim}{E}} - \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}}\right) \tag{2.147}$$

On peut également exprimer la loi de concentration en fonction de son tenseur d'accommodation, $\underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{\star}$:

$$\dot{\underset{\sim}{\sigma}}_{\mathrm{I}} = \dot{\underset{\sim}{\Sigma}} + \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{\star} : \left(\dot{\underset{\sim}{E}} - \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}}\right) \tag{2.148}$$

avec :

$$\underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{\star} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{eff} : \left(\underset{\sim}{\underset{\sim}{S}}^{-1} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{I}}\right) \tag{2.149}$$

En remplaçant dans (2.148) les vitesses en contrainte par les expressions équivalentes en déformation, (2.140) et (2.141), on trouve :

$$\left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}_{\mathrm{I}} + \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{\star}\right] : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} = \left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{eff} + \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{\star}\right] : \dot{\underset{\sim}{E}} \tag{2.150}$$

On peut alors en déduire le tenseur de localisation, $\underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_{\mathrm{I}}$, qui relie la vitesse de déformation locale à la vitesse de déformation globale :

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} = \left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}_{\mathrm{I}} + \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{\star}\right]^{-1} : \left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{eff} + \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{\star}\right] : \dot{\underset{\sim}{E}} \tag{2.151}$$

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} = \left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}_{\mathrm{I}} + \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{\star}\right]^{-1} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{eff} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{S}}^{-1} : \dot{\underset{\sim}{E}} \tag{2.152}$$

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} = \left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{S}} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{eff^{-1}} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}_{\mathrm{I}} + \underset{\sim}{\underset{\sim}{S}} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{eff^{-1}} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{\star}\right]^{-1} : \dot{\underset{\sim}{E}} \tag{2.153}$$

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} = \left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{S}} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{eff^{-1}} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}_{\mathrm{I}} + \underset{\sim}{\underset{\sim}{I}} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{S}}\right]^{-1} : \dot{\underset{\sim}{E}} \tag{2.154}$$

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} = \left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{I}} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{S}} : \left(\underset{\sim}{\underset{\sim}{I}} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{eff^{-1}} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}_{\mathrm{I}}\right)\right]^{-1} : \dot{\underset{\sim}{E}} \tag{2.155}$$

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_{\mathrm{I}} : \dot{\underset{\sim}{E}} \tag{2.156}$$

En introduisant cette nouvelle expression de la vitesse de déformation locale dans (2.140), on obtient :

$$\dot{\underset{\sim}{\sigma}}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}_{\mathrm{I}} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_{\mathrm{I}} : \dot{\underset{\sim}{E}} \tag{2.157}$$

En appliquant l'auto-cohérence pour l'homogénéisation des contraintes locales, une forme implicite de $\underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{eff}$ est obtenue :

$$\underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}^{eff} = \left\langle \underset{\sim}{\underset{\sim}{L}}_{\mathrm{I}} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_{\mathrm{I}} \right\rangle \tag{2.158}$$

2.5.3 Approximations du schéma auto-cohérent de Hill

La loi de concentration (2.148) se trouve simplifiée dans l'hypothèse d'une élasticité homogène :

$$\begin{aligned}
\dot{\underset{\sim}{\sigma}}_{\mathrm{I}} &= \dot{\underset{\sim}{\Sigma}} + \underset{\sim\sim}{L}^{\star} : \left[\underset{\sim\sim}{C}^{-1} : \left(\dot{\underset{\sim}{\Sigma}} - \dot{\underset{\sim}{\sigma}}_{\mathrm{I}}\right) + \left(\dot{\underset{\sim}{E}}^{p} - \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{p}_{\mathrm{I}}\right)\right] \\
\left(\dot{\underset{\sim}{\sigma}}_{\mathrm{I}} - \dot{\underset{\sim}{\Sigma}}\right) &: \left(\underset{\sim\sim}{I} + \underset{\sim\sim}{L}^{\star} : \underset{\sim\sim}{C}^{-1}\right) = \underset{\sim\sim}{L}^{\star} : \left(\dot{\underset{\sim}{E}}^{p} - \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{p}_{\mathrm{I}}\right) \\
\dot{\underset{\sim}{\sigma}}_{\mathrm{I}} &= \dot{\underset{\sim}{\Sigma}} + \left(\underset{\sim\sim}{I} + \underset{\sim\sim}{L}^{\star} : \underset{\sim\sim}{C}^{-1}\right)^{-1} : \underset{\sim\sim}{L}^{\star} : \left(\dot{\underset{\sim}{E}}^{p} - \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{p}_{\mathrm{I}}\right)
\end{aligned} \tag{2.159}$$

Plusieurs approximations sont alors possibles pour évaluer l'opérateur tangent effectif. Kröner [Kröner, 1961] propose une accommodation purement élastique de la matrice : $\underset{\sim\sim}{L}^{eff} = \underset{\sim\sim}{C}$. Le terme d'accommodation devient alors constant dans le temps, et il n'est donc plus nécessaire de travailler en vitesses de contrainte et de déformation. La loi de concentration suivante est alors obtenue si on applique ces modifications à l'équation (2.159) :

$$\underset{\sim}{\sigma}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{\Sigma} + \underset{\sim\sim}{C} : \left(\underset{\sim\sim}{I} - \underset{\sim\sim}{S}\right) : \left(\underset{\sim}{E}^{p} - \underset{\sim}{\varepsilon}^{p}_{\mathrm{I}}\right) \tag{2.160}$$

Cette équation fut reprise par Budiansky et Wu [Budiansky et Wu, 1962] dans le cas de l'élasticité isotrope pour une inclusion sphérique. Dans ce cas, la décomposition du tenseur d'élasticité est rendue possible (cf. 2.1.2). Il en va de même pour le tenseur d'Eshelby :

$$\underset{\sim\sim}{S} = \alpha\ \underset{\sim\sim}{K} + \beta\ \underset{\sim\sim}{J} \tag{2.161}$$

où α et β sont des constantes qui dépendent des propriétés élastiques du HEM (cf. E.1). On rappelle également que $\underset{\sim\sim}{I} = \underset{\sim\sim}{K} + \underset{\sim\sim}{J}$. En conséquence, l'équation de Kröner (2.160) devient :

$$\underset{\sim}{\sigma}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{\Sigma} + \left[3k(1-\alpha)\underset{\sim\sim}{K} + 2\mu(1-\beta)\underset{\sim\sim}{J}\right] : \left(\underset{\sim}{E}^{p} - \underset{\sim}{\varepsilon}^{p}_{\mathrm{I}}\right) \tag{2.162}$$

Certains termes disparaissent dans le cas où les traces des déformations plastiques sont nulles. La loi de concentration communément appelée KBW peut alors être obtenue :

$$\underset{\sim}{\sigma}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{\Sigma} + 2\mu(1-\beta)\left(\underset{\sim}{E}^{p} - \underset{\sim}{\varepsilon}^{p}_{\mathrm{I}}\right) \tag{2.163}$$

Dans une autre approche, Berveiller et Zaoui [Berveiller et Zaoui, 1979] proposent de conserver les interactions élasto-plastiques et de simplifier le problème en le traitant de manière isotrope. Cette approximation permet alors de décomposer $\underset{\sim\sim}{L}^{eff}$ en deux parties, l'une déviatorique et l'autre sphérique, à l'aide des opérateurs $\underset{\sim\sim}{J}$ et $\underset{\sim\sim}{K}$:

$$\underset{\sim\sim}{L}^{eff} = 2\mu^{L}\underset{\sim\sim}{J} + 3k^{L}\underset{\sim\sim}{K} \tag{2.164}$$

μ^{L} et k^{L} sont des modules tangents approchés. Si on effectue comme pour le modèle KBW les décompositions de $\underset{\sim\sim}{I}$, $\underset{\sim\sim}{C}$ et $\underset{\sim\sim}{S}$ (inclusion sphérique), et qu'on ne considère que la partie correspondant au tenseur $\underset{\sim\sim}{J}$ du fait que la trace des déformations plastiques est nulle, on simplifie l'équation (2.159) :

$$\dot{\underset{\sim}{\sigma}}_{\mathrm{I}} = \dot{\underset{\sim}{\Sigma}} + \frac{2\mu^{L}}{\frac{\beta}{1-\beta} + \frac{\mu^{L}}{\mu}}\left(\dot{\underset{\sim}{E}}^{p} - \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{p}_{\mathrm{I}}\right) \tag{2.165}$$

Il convient par la suite de reprendre la formulation du modèle KBW, en ajoutant une variable ω, qui contiendra les termes liés à l'opérateur tangent isotrope. La loi de concentration (BZ) s'écrit alors :

$$\dot{\underset{\sim}{\sigma}}_{\mathrm{I}} = \dot{\underset{\sim}{\Sigma}} + 2\mu(1-\beta)\,\omega\left(\dot{\underset{\sim}{E}}^{p} - \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{p}_{\mathrm{I}}\right) \quad \text{avec} \quad \omega = \frac{\mu^{L}}{\beta\mu + (1-\beta)\mu^{L}} \tag{2.166}$$

On remarque que si $\mu^{L} = \mu$, la loi de concentration KBW (2.163) est retrouvée. Les auteurs [Berveiller et Zaoui, 1979] proposent d'approcher la valeur de ω au travers de l'expression suivante, en supposant que sa valeur n'évolue pas au cours du temps, ce qui autorise à ne plus écrire l'équation précédente en vitesses :

$$\omega \approx \left[1 + \frac{3}{2}\,\mu\,\frac{\| \underset{\sim}{E}^{p} \|}{J(\underset{\sim}{\Sigma})}\right]^{-1} \qquad \text{avec} \quad \| \underset{\sim}{E}^{p} \| = \sqrt{\frac{2}{3}\underset{\sim}{E}^{p} : \underset{\sim}{E}^{p}} \tag{2.167}$$

2.5.4 Modèles basés sur la règle en β

La règle en β trouve son origine dans l'approche proposée par [Cailletaud, 1987], consistant à séparer la partie macroscopique et la partie locale dans le tenseur d'accommodation $\underset{\sim}{\mathcal{K}}_{\mathrm{I}}$ qui a été introduit dans l'équation (2.126). On introduit alors les variables d'état $\underset{\sim}{\mathrm{Y}}$ et $\underset{\sim}{\mathrm{Y}}_{\mathrm{I}}$ de manière à obtenir une loi de concentration qui, exprimée en termes de vitesse, s'écrira :

$$\dot{\underset{\sim}{\sigma}}_{\mathrm{I}} = \dot{\underset{\sim}{\Sigma}} + \dot{\underset{\sim}{\mathrm{Y}}} - \dot{\underset{\sim}{\mathrm{Y}}}_{\mathrm{I}} \tag{2.168}$$

L'intérêt est alors de prendre des évolutions non-linéaires propres à chaque échelle, et qui seront dépendantes des déformations plastiques si l'élasticité est traitée de manière uniforme. On note que le modèle a été développé initialement pour les polycristaux, et que l'on propose ici une approche plus générale :

$$\dot{\underset{\sim}{\mathrm{Y}}} = \frac{2}{3}\mathcal{C}\,\dot{\underset{\sim}{E}}^{p} - \mathcal{D}\underset{\sim}{\mathrm{Y}}\,\| \dot{\underset{\sim}{E}}^{p} \| \tag{2.169}$$

$$\dot{\underset{\sim}{\mathrm{Y}}}_{\mathrm{I}} = \frac{2}{3}\mathcal{C}_{\mathrm{I}}\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{p}_{\mathrm{I}} - \mathcal{D}_{\mathrm{I}}\underset{\sim}{\mathrm{Y}}_{\mathrm{I}}\,\| \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{p}_{\mathrm{I}} \| \tag{2.170}$$

Le principe de la règle en β vient donc de l'idée que l'on peut remplacer les vitesses de déformation plastique par des variables non-linéaires, ce qui procure une plus grande liberté pour reproduire les phénomènes mécaniques non-linéaires.
Si on reprend à présent la loi de concentration BZ (2.166), on constate que la non-linéarité est portée par le terme d'accommodation ω. La règle en β permet de transférer cette non-linéarité dans la partie tensorielle, ce qui conduit à un terme d'accommodation scalaire constant, et identique à celui présenté pour le modèle KBW (2.163). Dans ce cadre, les déformations plastiques sont remplacées par des variables que l'on appellera $\underset{\sim}{\beta}_{\mathrm{I}}$. Cette loi de concentration s'écrit :

$$\underset{\sim}{\sigma}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{\Sigma} + 2\mu(1-\beta)(\underset{\sim}{\mathcal{B}} - \underset{\sim}{\beta}_{\mathrm{I}}) \tag{2.171}$$

A la différence de $\underset{\sim}{\mathrm{Y}}$, le tenseur $\underset{\sim}{\mathcal{B}}$ est calculé à partir de l'auto-cohérence :

$$\underset{\sim}{\mathcal{B}} = \left\langle \underset{\sim}{\beta}_{\mathrm{I}} \right\rangle \tag{2.172}$$

L'évolution de $\underset{\sim}{\beta}_{\mathrm{I}}$ sera assez similaire à celle de $\underset{\sim}{\mathrm{Y}}_{\mathrm{I}}$ [Pilvin et Cailletaud, 1990], [Cailletaud et Pilvin, 1994] :

$$\dot{\underset{\sim}{\beta}}_{\mathrm{I}} = \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{p}_{\mathrm{I}} - \mathcal{D}_{\mathrm{I}}\underset{\sim}{\beta}_{\mathrm{I}}\,\| \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{p}_{\mathrm{I}} \| \tag{2.173}$$

Les paramètres $\mathcal{D}_I$ sont ici les termes permettant d'ajuster la non-linéarité produite par le modèle. Il est également courant d'ajouter un terme linéaire pour jouer sur la saturation en contrainte [Pilvin, 1994] :

$$\dot{\underset{\sim}{\beta}}_I = \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^p_I - \mathcal{D}_I(\underset{\sim}{\beta}_I - \delta_I \underset{\sim}{\varepsilon}^p_I) \parallel \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^p_I \parallel \tag{2.174}$$

Un modèle en β tenant compte des hétérogénéités élastiques a été proposé assez récemment dans le cadre des élastomères thermoplastiques par [Ausias *et al.*, 2007] :

$$\underset{\sim}{\sigma}_I = \underset{\sim}{A}_I : \left[\underset{\sim}{\Sigma} + \underset{\sim}{D}_I : (\underset{\sim}{\mathcal{B}} - \underset{\sim}{\beta}_I)\right] \tag{2.175}$$

L'évolution des variables $\underset{\sim}{\beta}_I$ s'écrit comme précédemment ((2.173) ou (2.174)), mais le calcul de $\underset{\sim}{\mathcal{B}}$ est sensiblement différent :

$$\underset{\sim}{\mathcal{B}} = \left\langle \underset{\sim}{A}_I : \underset{\sim}{D}_I \right\rangle^{-1} : \left\langle \underset{\sim}{A}_I : \underset{\sim}{D}_I : \underset{\sim}{\beta}_I \right\rangle \tag{2.176}$$

2.5.5 Schémas auto-cohérents en élasto-viscoplasticité

L'homogénéisation des comportements élasto-viscoplastiques est un sujet complexe à traiter : la présence simultanée des mécanismes instantanés de l'élasticité et de ceux dépendants du temps de la viscoplasticité conduit à des relations complexes qui peuvent être difficiles à modéliser. Il est donc plus simple de traiter des problèmes élasto-plastiques comme vu précédemment, ou bien des problèmes purement viscoplastiques avec par exemple le modèle incrémental de [Hutchinson, 1966], repris par la suite de manière non-incrémentale par [Molinari *et al.*, 1987]. Le premier a étendu le schéma auto-cohérent de Hill aux déformations viscoplastiques pour simuler le comportement en fluage des polycristaux, tandis que le second modèle a été repris par Lebensohn et Tomé [Lebensohn et Tomé, 1993], [Lebensohn et Tomé, 1994] pour simuler en grandes déformations le comportement de plusieurs classes d'alliages métalliques.

En première approche, certains auteurs proposent de remplacer de manière abrupte la déformation plastique $\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^p$ par son équivalent viscoplastique $\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{vp}$ dans les lois de concentration. Weng [Weng, 1982] justifie ce choix en faisant remarquer que pour un incrément de temps donné, la dérivée de la déformation viscoplastique peut être calculée à partir de l'état de contrainte et non de la vitesse de contrainte. Il en déduit que contrairement au cas de la plasticité, l'écoulement viscoplastique peut être considéré comme une déformation libre et que, par conséquent, sa prise en compte s'effectue simplement par le problème d'Eshelby. Il propose donc de reprendre le modèle KBW avec des déformations viscoplastiques. D'autres auteurs [Nemat-Nasser et Obata, 1986] vont également s'intéresser à l'hypothèse de viscoplasticité comme déformation libre. Dans un contexte de grandes déformations, ils proposent de résoudre le problème d'Eshelby, à travers les fonctions de Green comme pour le modèle de Hill, en imposant une vitesse de déformation viscoplastique uniforme à la matrice. Ce modèle fut ensuite implémenté par Harren [Harren, 1991], pour simuler par une méthode Eléments Finis la déformation de polycristaux 3D. Les résultats montrent une réponse en déformation du modèle très proche de celle obtenue avec le modèle de Taylor, notamment dans le cadre des grandes déformations (Fig.2.3).

Dans la pratique, il n'est néanmoins pas rare de retrouver ce type de substitution car il s'agit de modèles faciles à implémenter. La surestimation des contraintes internes liée au modèle est alors compensée numériquement au travers des paramètres matériau, ou bien

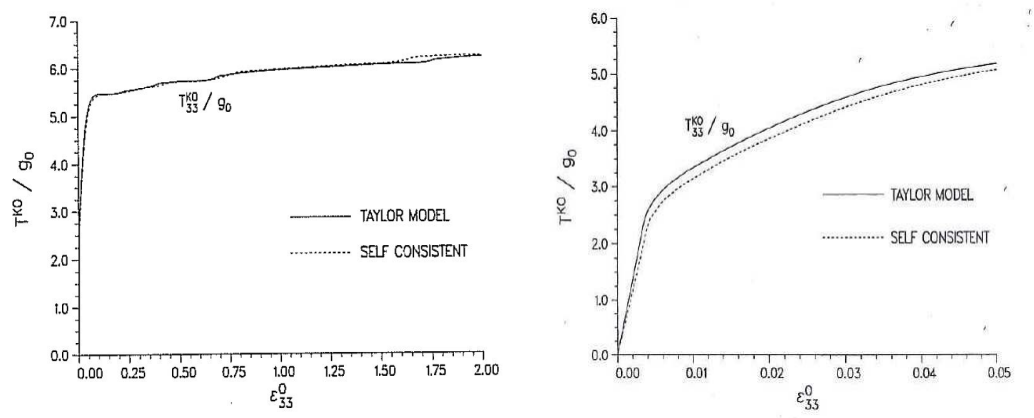


FIGURE 2.3 – Comparaison des prédictions des modèles de Harren et de Taylor en traction uniaxiale, dans le cadre des grandes déformations (gauche) et des petites déformations (droite). [Harren, 1991]

par l'utilisation d'une règle en β, qui permet au travers de ses paramètres $\mathcal{D}_{\mathrm{I}}$ de forcer le modèle à s'accommoder plastiquement.

Comme le soulignent Zaoui et Masson [Zaoui et Masson, 1998], en accord avec les remarques antérieures faites par [Zaoui et Raphanel, 1991] et [Kouddane *et al.*, 1993], l'hypothèse de Weng selon laquelle la viscoplasticité est un phénomène indépendant de la contrainte n'est pas valide. L'introduction de la viscoplasticité en tant que déformation libre dans la solution classique du problème d'Eshelby n'est donc pas admissible. Pour des raisons similaires, dans le problème d'Eshelby proposé par Nemat-Nasser et Obata, la matrice possède un comportement élastique et subit une déformation $\dot{\underset{\sim}{E}}^{vp}$. Les interactions entre phases restent donc purement élastiques, ce qui conduit à une surestimation de l'opérateur tangent global, comme dans le cas du modèle de Taylor. Ceci se vérifie d'ailleurs avec les expressions proposées dans le cas visqueux pour les opérateurs tangents locaux en plasticité de von Mises (2.54) et en plasticité cristalline (2.75) : ces opérateurs tangents locaux qui se veulent au premier abord de nature élasto-viscoplastique deviennent en réalité de nature purement élastique lorsque le pas de temps pour la résolution numérique est faible :

$$\underset{\sim}{L}_{\mathrm{I}} \rightarrow \underset{\sim}{C}_{\mathrm{I}} \quad \text{lorsque} \quad \Delta t \rightarrow 0$$

Certains auteurs [Doghri *et al.*, 2010] font également cette remarque avec d'autres types de loi de comportement, et proposent une régularisation afin que l'opérateur tangent exprimé à l'instant $t+\Delta t$ tende vers sa valeur à l'instant t lorsque Δt tend vers zéro :

$$\underset{\sim}{L}^{reg}(t+\Delta t) = \underset{\sim}{L}^{ep}(t+\Delta t) + \left(\underset{\sim}{L}^{reg}(t) - \underset{\sim}{L}^{ep}(t+\Delta t)\right) exp\left(-\frac{h_{ep}}{h_v - h_{ep}}\right) \tag{2.178}$$

où $\underset{\sim}{L}^{reg}$ est l'opérateur tangent régularisé, $\underset{\sim}{L}^{ep}$ est l'opérateur tangent dans le cas indépendant de la vitesse, tel que nous l'avons défini en (2.47), h_{ep} est un dénominateur élasto-plastique et h_v est un dénominateur viscoplastique.

Cette stratégie, qui vise à trouver une expression mathématique adéquate pour l'opérateur tangent local n'est pas sans inconvénient. Fondamentalement, il n'existe pas en élasto-viscoplasticité de solution unique permettant de relier localement la vitesse en contrainte à

celle en déformation, comme c'est le cas en plasticité indépendante du temps (2.44). Cette démarche sera néanmoins développée dans le cadre d'une discussion au cours du chapitre suivant (3.3), puisqu'elle offre l'avantage de pouvoir continuer à utiliser simplement les modèles développés dans le cadre élasto-plastique.

Une autre approche possible se concentre sur la nature des interactions inclusion/matrice. Dans ce contexte, l'opérateur tangent, qui définissait les modules instantanés élasto-viscoplastiques, est remplacé par des opérateurs intermédiaires qui permettent de découpler le problème spatio-temporel. A ce titre, un certain nombre de modèles ont été développés ces vingt dernières années. Une revue non-exhaustive de ces modèles peut être trouvée dans [Molinari *et al.*, 1997] et [Sabar *et al.*, 2002] par exemple. Dans ce contexte, Weng a proposé des modifications de son modèle d'origine, afin de limiter les interactions entre phases [Li et Weng, 1997]. D'autres auteurs ont proposé d'introduire un nouveau module macroscopique dépendant du temps ($\underset{\sim}{\underset{\sim}{M}}$) qui serait une combinaison de l'opérateur tangent élastique ($\underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}$) et de l'opérateur sécant viscoplastique ($\underset{\sim}{\underset{\sim}{B}}$) [Kouddane *et al.*, 1993]. Les auteurs font également le choix de prendre des modules macroscopiques isotropes. La relation devient :

$$\underset{\sim}{\underset{\sim}{M}} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{B}} = \lambda \ \underset{\sim}{\underset{\sim}{I}} \tag{2.179}$$

où λ est un paramètre matériau dépendant du module de cisaillement et des paramètres de viscosité. La loi de concentration suivante peut alors être obtenue :

$$\dot{\underset{\sim}{\sigma}}_{\mathrm{I}} = \dot{\underset{\sim}{\Sigma}} - \lambda \left(\underset{\sim}{\sigma}_{\mathrm{I}} - \underset{\sim}{\Sigma} \right) - 3\mu \left(\dot{\underset{\sim}{E}} - \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} \right) \tag{2.180}$$

Ce modèle sera ensuite généralisé par [Molinari *et al.*, 1997] pour le cas anisotrope et en prenant en compte la compressibilité élastique.

Une approche dite héréditaire est également possible : le comportement local élasto-viscoplastique est linéarisé pour un pas de temps donné, de manière à obtenir un problème visco-élastique qui pourra être traité *via* la transformée de Laplace-Carson. Ce type de méthode a été en premier lieu utilisé pour adapter le schéma auto-cohérent de Hill [Rougier *et al.*, 1994], puis dans un schéma auto-cohérent affine [Masson et Zaoui, 1999], [Brenner *et al.*, 2002]. Ces modèles sont très coûteux en temps et en espace de calcul en raison du passage à la transformée de Laplace-Carson.

Plus récemment, des lois d'interaction complexes ont pu être développées grâce à l'utilisation de techniques de champs translatés et d'opérateurs de projection. Ces lois sont basées sur deux cas assymptotiques : l'élasticité pure, qui est un mécanisme qui s'exprime sur les temps courts, et la viscoplasticité pure, qui agit sur des temps plus longs.
Le premier modèle, proposé par [Paquin *et al.*, 1999], permet de conserver les symétries entre l'élasticité et la viscoplasticité. Ce modèle a ensuite été utilisé avec succès pour calculer la réponse en déformation de composites et de matériaux polycristallins [Paquin *et al.*, 2001]. Le second modèle, développé par [Sabar *et al.*, 2002] et [Favier *et al.*, 2003] suit le même raisonnement mais ne tient pas compte de la symétrie entre l'élasticité et la viscoplasticité. Il a également été étendu aux polycristaux par [Berbenni *et al.*, 2004]. Dans la pratique, les deux modèles s'avèrent proches de la solution affine de [Masson et Zaoui, 1999], comme le montre [Berbenni, 2002]. Dans ce type d'approche, les comportements spécifiques de l'élasticité et de la viscoplasticité doivent être définis :

Comportement purement élastique

$$\underset{\sim}{\sigma}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_{\mathrm{I}} : \underset{\sim}{\varepsilon}^{e}_{\mathrm{I}} \tag{2.181}$$

$$\underset{\sim}{\Sigma} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}} : \underset{\sim}{E}^{e} \tag{2.182}$$

$$\underset{\sim}{\varepsilon}^{e}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}^{C}_{\mathrm{I}} : \underset{\sim}{E}^{e} \tag{2.183}$$

$$\underset{\sim}{\underset{\sim}{C}} = \left\langle \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_{\mathrm{I}} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}^{C}_{\mathrm{I}} \right\rangle \tag{2.184}$$

Comportement purement viscoplastique

$$\underset{\sim}{\sigma}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{B}}_{\mathrm{I}} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{vp}_{\mathrm{I}} \tag{2.185}$$

$$\underset{\sim}{\Sigma} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{B}} : \dot{\underset{\sim}{E}}^{vp} \tag{2.186}$$

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{vp}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}^{B}_{\mathrm{I}} : \dot{\underset{\sim}{E}}^{vp} \tag{2.187}$$

$$\underset{\sim}{\underset{\sim}{B}} = \left\langle \underset{\sim}{\underset{\sim}{B}}_{\mathrm{I}} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}^{B}_{\mathrm{I}} \right\rangle \tag{2.188}$$

où $\underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}^{C}_{\mathrm{I}}$ et $\underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}^{B}_{\mathrm{I}}$ sont des tenseurs de localisation, tandis que $\underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_{\mathrm{I}}$ et $\underset{\sim}{\underset{\sim}{B}}_{\mathrm{I}}$ sont respectivement les tenseurs d'élasticité et de viscoplasticité locaux, à partir desquels il est possible d'obtenir par auto-cohérence leurs équivalents à l'échelle macroscopique $\underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}$ et $\underset{\sim}{\underset{\sim}{B}}$.

Dans le modèle de Sabar et al. qui sera présenté par la suite, le tenseur d'élasticité local est considéré comme égal au tenseur d'élasticité effectif auquel vient s'ajouter une fluctuation $\delta\underset{\sim}{\underset{\sim}{c}}_{\mathrm{I}}$:

$$\underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}} + \delta\underset{\sim}{\underset{\sim}{c}}_{\mathrm{I}} \tag{2.189}$$

On peut alors faire l'analogie avec le problème de l'inclusion dans un milieu homogène infini (Annexe D), à la différence que ce dernier n'a pas une élasticité homogène. En conséquence, le terme u_i^0 n'est plus nul, et le déplacement d'un point x au sein de l'inclusion s'écrit :

$$u_i(x) = u_i^0(x) - \int_{\Omega} G_{ij,p'}(x-x')\delta c_{\mathrm{I}jpkl}\ u_{l,k'}(x')\ d\Omega' \tag{2.190}$$

ce qui donne en déformation :

$$\varepsilon^{e}_{ij} = E^{e}_{ij} - \int_{\Omega} \Gamma^{C}_{ijkl}\delta c_{\mathrm{I}klmn}\ \varepsilon^{e}_{mn}\ d\Omega' \tag{2.191}$$

où $\underset{\sim}{\Gamma}^{C}$ est le tenseur de Green modifié appliqué au tenseur d'élasticité $\underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}$. Dans sa forme générale, il s'écrit :

$$\Gamma_{ijkl} = \frac{1}{2}\left(G_{ik,jl} + G_{jk,il}\right) \tag{2.192}$$

En faisant intervenir le produit de convolution ($*$), on peut réécrire l'équation intégrale (2.191) sous la forme bien connue de l'équation de Lippman-Schwinger :

$$\underset{\sim}{\varepsilon}^{e}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{E}^{e} - \underset{\sim}{\Gamma}^{C} * \ \delta\underset{\sim}{\underset{\sim}{c}}_{\mathrm{I}} : \underset{\sim}{\varepsilon}^{e}_{\mathrm{I}} \tag{2.193}$$

En l'état, le traitement de l'opérateur de Green modifié peut s'avérer complexe. Il est alors commun de faire l'approximation proposée initialement par [Kröner, 1958], qui consiste à supposer que le tenseur de Green modifié est décomposable en une partie locale (l) et une partie non-locale (nl). La partie non-locale, qui contient la convolution, sera négligée par la suite, tandis que la partie locale pourra être facilement reliée au tenseur d'Eshelby :

$$\underset{\sim}{\underset{\sim}{S}} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{\Gamma}}^{C}_{\mathrm{I}} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}} \tag{2.194}$$

Une expression du tenseur de localisation peut être déduite de l'équation (2.193). En ne conservant que la partie locale, ce dernier s'écrit :

$$\underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}^{C}_{\mathrm{I}} = \left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{I}} + \underset{\sim}{\underset{\sim}{\Gamma}}^{C}_{\mathrm{I}} : \delta\underset{\sim}{\underset{\sim}{c}}_{\mathrm{I}}\right]^{-1} \tag{2.195}$$

Le même développement peut être réalisé pour le cas viscoplastique. Une forme analogue pour $\underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{B}$ est alors obtenue :

$$\underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{B} = \left[\underset{\sim}{I} + \underset{\sim}{\Gamma}_{1}^{B} : \delta\underset{\sim}{b}_{\mathrm{I}}\right]^{-1} \tag{2.196}$$

où $\delta\underset{\sim}{b}_{\mathrm{I}}$ est une fluctuation telle que $\underset{\sim}{B}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{B} + \delta\underset{\sim}{b}_{\mathrm{I}}$, et où $\underset{\sim}{\Gamma}_{1}^{B}$ est la partie locale du tenseur de Green modifié, appliqué cette fois-ci à l'opérateur sécant $\underset{\sim}{B}$. On rappelle par ailleurs que tout tenseur de localisation a la propriété suivante :

$$\left\langle \underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{B} \right\rangle = \left\langle \underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{C} \right\rangle = \underset{\sim}{I} \tag{2.197}$$

Si on considère maintenant le cas élasto-viscoplastique, en se référant toujours à [Sabar *et al.*, 2002], la vitesse de déformation viscoplastique dans une inclusion telle que définie par l'équation (2.187) se trouve modifiée par l'ajout d'une fluctuation $\delta\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}}^{vp}$:

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}}^{vp} = \underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{B} : \dot{\underset{\sim}{E}}^{vp} + \delta\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}}^{vp} \tag{2.198}$$

Par ailleurs, du fait que $div(\underset{\sim}{\sigma}) = 0$ et que les champs de déformation sont supposés compatibles, les trois égalités suivantes sont à respecter :

$$\underset{\sim}{\Gamma}_{1}^{C} : \dot{\underset{\sim}{\sigma}}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{0} \tag{2.199}$$

$$\underset{\sim}{\Gamma}_{1}^{C} : \underset{\sim}{C} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} = \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} - \dot{\underset{\sim}{E}} \tag{2.200}$$

$$\underset{\sim}{\Gamma}_{1}^{C} : \underset{\sim}{C} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}}^{vp} = \underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{B} : \dot{\underset{\sim}{E}}^{vp} - \dot{\underset{\sim}{E}}^{vp} + \underset{\sim}{\Gamma}_{1}^{C} : \underset{\sim}{C} : \delta\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}}^{vp} \tag{2.201}$$

A partir de ces équations, et des expressions des tenseurs de localisation (2.195) et (2.196), il est possible d'exprimer la vitesse de déformation locale en fonction des vitesses de déformation globales et de la vitesse de déformation plastique locale :

$$\underset{\sim}{\Gamma}_{1}^{C} : \dot{\underset{\sim}{\sigma}}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{\Gamma}_{1}^{C} : \underset{\sim}{C} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}}^{e} = \underset{\sim}{\Gamma}_{1}^{C} : \delta\underset{\sim}{c}_{\mathrm{I}} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}}^{e} + \underset{\sim}{\Gamma}_{1}^{C} : \underset{\sim}{C} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} - \underset{\sim}{\Gamma}_{1}^{C} : \underset{\sim}{C} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}}^{vp} = \underset{\sim}{0}$$

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} + \underset{\sim}{\Gamma}_{1}^{C} : \delta\underset{\sim}{c}_{\mathrm{I}} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} = \dot{\underset{\sim}{E}}^{e} + \underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{B} : \dot{\underset{\sim}{E}}^{vp} + \underset{\sim}{\Gamma}_{1}^{C} : \underset{\sim}{C} : \delta\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}}^{vp} + \underset{\sim}{\Gamma}_{1}^{C} : \delta\underset{\sim}{c}_{\mathrm{I}} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}}^{vp}$$

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{C} : \dot{\underset{\sim}{E}}^{e} + \underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{C} : \underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{B} : \dot{\underset{\sim}{E}}^{vp} + \underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{C} : \underset{\sim}{\Gamma}_{1}^{C} : \left(\underset{\sim}{C}_{\mathrm{I}} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}}^{vp} - \underset{\sim}{C} : \underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{B} : \dot{\underset{\sim}{E}}^{vp}\right) \tag{2.202}$$

On remarque dans l'équation précédente que lorsque $\dot{\underset{\sim}{E}}^{e} = \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{e} = \underset{\sim}{0}$, on retrouve le cas purement viscoplastique (2.187), et lorsque $\dot{\underset{\sim}{E}}^{vp} = \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{vp} = \underset{\sim}{0}$, on obtient le cas purement élastique défini par (2.183). A partir de l'équation (2.202) et de la relation d'élasticité locale, on peut déterminer la loi de concentration du modèle :

$$\dot{\underset{\sim}{\sigma}}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{C}_{\mathrm{I}} : \underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{C} : \underset{\sim}{C}^{-1} : \dot{\underset{\sim}{\Sigma}} + \underset{\sim}{C}_{\mathrm{I}} : \underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{C} : \left(\underset{\sim}{S} - \underset{\sim}{I}\right) : \left(\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}}^{vp} - \underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{B} : \dot{\underset{\sim}{E}}^{vp}\right) \tag{2.203}$$

La vitesse de déformation plastique effective sera déterminée en appliquant l'auto-cohérence sur l'équation (2.202) :

$$\left\langle \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}} \right\rangle = \dot{\underset{\sim}{E}} \;\Rightarrow\; \dot{\underset{\sim}{E}}^{vp} = \left[\underset{\sim}{I} - \left\langle \underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{C} : \left(\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{S}\right) : \underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{B} \right\rangle\right]^{-1} : \left\langle \underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{C} : \underset{\sim}{\Gamma}_{1}^{C} : \underset{\sim}{C}_{\mathrm{I}} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}}^{vp} \right\rangle \tag{2.204}$$

Pour plus de simplicité, on écrit :

$$\dot{\underset{\sim}{E}}^{vp} = \left[\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{M}\right]^{-1} : \underset{\sim}{d} \tag{2.205}$$

$$\text{avec} \quad \underset{\sim}{M} = \left\langle \underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{C} : \left(\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{S}\right) : \underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{B} \right\rangle \tag{2.206}$$

$$\text{et} \quad \underset{\sim}{d} = \left\langle \underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{C} : \underset{\sim}{\Gamma}_{1}^{C} : \underset{\sim}{C}_{\mathrm{I}} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}}^{vp} \right\rangle \tag{2.207}$$

2.6 Conclusions partielles

Dans ce chapitre, la base théorique sur laquelle s'appuie notre travail a été mise en place. Des lois de comportement local de type phénoménologique ont été proposées, pour permettre de prédire de manière simple le comportement du matériau sous sollicitations multi-axiales, en représentant notamment l'écrouissage par des variables cinématiques et isotropes. Deux types d'approches seront utilisés dans notre travail pour la plasticité :

- une approche macroscopique utilisant le critère de von Mises qui peut décrire de manière isotrope soit le comportement macroscopique du matériau, soit le comportement individuel des phases. Ce critère s'avère très pratique en première approche puisqu'il conduit à des modèles composés d'un nombre restreint de variables. On a vu également que le critère de von Mises pouvait être étendu de manière à simuler un comportement anisotrope à l'échelle macroscopique.

- le cadre de la plasticité cristalline, où chaque système de glissement du matériau est identifié, et qui donne la possibilité de décrire un écoulement plastique anisotrope au sein de chaque cristal.

Ces lois de comportement vont pouvoir alimenter les modèles à champs moyens introduits dans ce chapitre. On a vu que les techniques d'homogénéisation sont des outils très efficaces, puisqu'elles permettent de calculer rapidement les champs de contrainte et de déformation effectifs du matériau hétérogène à partir des comportements locaux de chacune des phases. En comparaison, les calculs éléments finis se révèlent beaucoup plus coûteux en temps et en espace de calcul.
La succincte revue bibliographique sur les lois de concentration a permis de mettre évidence la grande diversité des modèles à champs moyens, développés en premier lieu pour les comportements élasto-plastique et viscoplastique, puis pour le cas plus délicat de l'élasto-viscoplasticité. Le choix du modèle se fera en fonction des hypothèses et des simplifications apportées à chacun d'entre eux.

Dans le chapitre suivant, l'objectif sera d'adapter ces modèles aux alliages de titane β-métastable, et à leurs caractéristiques présentées dans le premier chapitre. Pour cela, on sera amené à sortir du cadre classique développé ici, il faudra donc mettre en place des outils de contrôle pour s'assurer de l'intégrité des modèles développés.

Chapitre 3

Homogénéisation du comportement élasto-viscoplastique des alliages de titane β-métastable à température ambiante

3.1 Simulation du comportement mécanique des microstructures industrielles de Ti5553 et de Ti17 à partir de modèles à champs moyens

3.1.1 Stratégie d'identification

L'identification des paramètres matériau du Ti17 Snecma et du Ti5553 MBD en plasticité cristalline pour les différents modèles qui seront développés dans ce chapitre va s'appuyer sur la base de données expérimentales du projet PROMITI. Du fait de la structure multi-échelles des modèles, le processus d'identification est complexe : il s'agit d'attribuer des valeurs à des constantes représentatives de l'échelle microscopique tout en assurant une réponse macroscopique comparable à l'expérience. On ne peut pas dans ces conditions garantir avec certitude que la solution proposée est unique.

Les données expérimentales apportées par le projet PROMITI qui peuvent être utilisées dans le cadre de notre travail sont :

- Les courbes de traction uniaxiale sur du Ti17 et du Ti5553 100% β ;
- Les courbes de traction uniaxiale avec trois vitesses différentes de déformation sur les alliages de microstructure industrielle ;
- Les courbes de fatigue LCF pour une vitesse donnée sur les alliages de microstructure industrielle ;
- Les courbes de traction uniaxiale sur les alliages possédant des microstructures élémentaires ;

- La contribution à la déformation de chaque famille de systèmes de glissement de la phase α à 1.83% de déformation totale (cf. p.12)

A partir de ces essais, on propose la stratégie suivante pour l'identification :

1. On se concentrera dans un premier temps uniquement sur l'élasticité : il s'agit d'identifier les composantes non-nulles des tenseurs d'élasticité des deux phases. Pour cela, on se basera sur les modules d'Young expérimentaux de microstructures en Ti17 et en Ti5553 possédant des distributions de phase différentes.

2. On s'intéressera ensuite à la partie viscoplastique. Dans un premier temps, seul le comportement viscoplastique de la phase β sera étudié grâce aux essais de traction expérimentaux réalisés sur du matériau monophasé 100% β. Ce comportement sera néanmoins dissocié de celui que l'on attribuera par la suite à la matrice β des alliages biphasés, puisque le confinement morphologique aura un effet sur les propriétés mécaniques.

3. En se basant sur les paramètres identifiés dans les étapes précédentes, on pourra obtenir les paramètres matériau des variants α et de la matrice β. Pour cela, on s'appuiera sur les courbes de traction uniaxiale à différentes vitesses de sollicitation, et on veillera à ce que la répartition donnée précédemment pour les familles de systèmes de glissement de la phase α soit respectée. On donnera également un jeu de paramètres matériau pour le comportement en fatigue LCF de chacun des deux alliages.

3.1.2 Comportement élastique de la phase β

Le module d'Young mesuré expérimentalement sur les courbes σ–ε présentées en annexe est de 60GPa pour le Ti17 100% β (Fig.B.1.1) et de 68GPa pour le Ti5553 100% β (Fig.B.2.1). On va donc chercher à déterminer les constantes d'élasticité de la phase β de ces alliages en tenant compte de ces résultats et des valeurs données dans la littérature (Tab.1.2).

Pour calculer le module d'Young effectif, équivalent à celui d'un agrégat 100% β dont le nombre de grains est suffisamment important pour que l'élasticité effective soit isotrope, et le comparer à celui obtenu expérimentalement, on propose une méthode analytique, similaire à celle proposée par [Gairola et Kröner, 1981]. Pour cela, l'équation auto-cohérente proposée par Hill (2.158) est reprise dans le cas purement élastique (3.1). Le problème d'Eshelby revient alors à considérer chaque grain comme une inclusion dans un HEM représentant le reste de l'aggrégat (Fig.2.2).

$$\left\langle \left(\underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_{\mathrm{I}} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{\Lambda}} \right) : \left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{I}} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{S}} : \left(\underset{\sim}{\underset{\sim}{I}} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{\Lambda}}^{-1} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_{\mathrm{I}} \right) \right]^{-1} \right\rangle = \underset{\sim}{\underset{\sim}{0}} \tag{3.1}$$

Le tenseur d'élasticité $\underset{\sim}{\underset{\sim}{\Lambda}}$ de l'agrégat polycristallin isotrope peut être décomposé selon la méthode décrite dans la section 2.1.2, tandis que le tenseur d'élasticité cubique de chaque grain β sera décomposé selon les équations présentées en section 2.1.3. Le tenseur d'Eshelby est décomposable dans le cas particulier de l'inclusion sphérique au sein d'un milieu isotrope

(2.161). L'équation (3.1) peut donc être réécrite en fonction des opérateurs $\underset{\approx}{K}$, $\underset{\approx}{J}'$ et $\underset{\approx}{J}''$:

$$\frac{3(k-k')}{1-\alpha(1-\frac{k'}{k})}\left\langle \underset{\approx}{K} \right\rangle + \frac{2(\mu-\mu')}{1-\beta(1-\frac{\mu'}{\mu})}\left\langle \underset{\approx}{J}' \right\rangle + \frac{2(\mu-\mu'')}{1-\beta(1-\frac{\mu''}{\mu})}\left\langle \underset{\approx}{J}'' \right\rangle = \underset{\approx}{0} \tag{3.2}$$

Les constantes présentées ci-dessus sont caractéristiques du HEM, par conséquent, elles ne sont pas incluses dans l'opération de moyenne. De plus, un calcul de moyenne conduit à :

$$\left\langle \underset{\approx}{K} \right\rangle = \underset{\approx}{K}, \quad \left\langle \underset{\approx}{J}' \right\rangle = \frac{2}{5}\underset{\approx}{J}, \quad \left\langle \underset{\approx}{J}'' \right\rangle = \frac{3}{5}\underset{\approx}{J} \tag{3.3}$$

L'équation (3.2) s'en trouve simplifiée et peut alors s'écrire sous la forme :

$$a\,\underset{\approx}{K} + b\,\underset{\approx}{J} = \underset{\approx}{0} \tag{3.4}$$

où a et b sont des constantes. Deux conditions doivent alors être respectées (3.4) :

- $a = 0$, ce qui implique que $k = k'$;
- $b = 0$, ce qui amène à un polynôme du troisième degré :

$$f(\mu) = 8\mu^3 + \left(9k' + 4\mu'\right)\mu^2 - \left(3k' + 12\mu'\right)\mu''\mu - 6k'\mu'\mu'' = 0 \tag{3.5}$$

La résolution de l'équation polynomiale est dans ce cas possible, et conduit à trois solutions dont une seule est positive. A partir des constantes d'élasticité cubique d'un grain β, il est alors possible de calculer la paire $\{k, \mu\}$ qui définit l'élasticité isotrope du polycristal. En utilisant les correspondances données en annexe (E.1), on peut alors remonter aux valeurs du module d'Young et du coefficient de Poisson.

On remarque également la propriété suivante : si les constantes d'élasticité locales sont choisies proportionnelles à des valeurs de référence ($\underset{\approx}{C}_{\mathrm{I}} = \delta\underset{\approx}{C}_0$), on obtient :

- $k = \delta k_0$;
- $f(\mu) = 8\mu^3 + \delta\left(9k'_0 + 4\mu'_0\right)\mu^2 - \delta^2\left(3k'_0 + 12\mu'_0\right)\mu''_0\mu - 6\delta^3 k'_0\mu'_0\mu''_0$

La solution pour que $f(\mu)$ soit nulle revient à imposer $\mu = \delta\mu_0$. Cela signifie que lorsque l'on prend des constantes d'élasticité locales proportionnelles à celles d'un matériau de référence, on impose également cette proportionnalité à l'échelle du HEM. Plus concrètement, la proportionnalité δ imposée indirectement à μ et k conduit à multiplier également E par δ, tandis que ν ne sera pas affecté. Cela signifie aussi que le facteur d'anisotropie de Zener sera conservé (2.23).

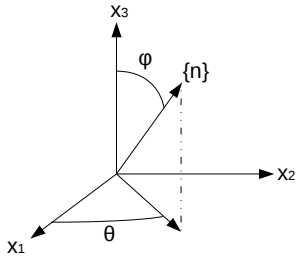
Dans ces conditions, on choisira de réajuster le tenseur d'élasticité (3.1), en conservant une proportionnalité par rapport à d'autres jeux de constantes de la littérature [Herbig, 2011], ce qui fournira, au travers de l'équation (3.5), un module d'Young proche de celui mesuré expérimentalement. On utilisera également cette expression analytique pour calculer les modules d'Young et les coefficients de Poisson des polycristaux élastiques isotropes qui peuvent être décrits à partir des constantes d'élasticité locales de la littérature (Tab.3.2).

C_{1111} (GPa)	C_{1122} (GPa)	C_{2323} (GPa)	E (GPa)	ν
100	70	36	69.45	0.355

TABLE 3.1 – Constantes d'élasticité choisies pour la phase β ($\delta \approx \frac{2}{3}$ par rapport à [Herbig, 2011]).

Ces constantes d'élasticité semblent assez faibles par rapport à l'ensemble des constantes de la littérature, bien que proches de celles mesurées sur des alliages de type Ti-Nb-Ta-Zr (Tab.1.2). Certains auteurs [Kuroda *et al.*, 1998] ont montré que la nature et la composition en éléments d'alliage avaient une influence notable sur les constantes d'élasticité de la phase β. Par conséquent, on peut être amené à penser que la composition chimique du Ti17 et du Ti5553 se traduit par une phase β plus molle, en terme d'élasticité, que celle d'autres alliages.

On va maintenant s'intéresser à l'élasticité des monocristaux β : il est en effet possible de déterminer le module d'Young d'un monocristal cubique en fonction des angles qui définissent la direction de sollicitation [Cazzani et Rovati, 2003]. On écrit dans le cas d'une contrainte de direction aléatoire :



$$\{n\} = \begin{pmatrix} sin(\varphi)cos(\theta) \\ sin(\varphi)sin(\theta) \\ cos(\varphi) \end{pmatrix}$$

L'expression de la déformation et de la contrainte suivant $\{n\}$ s'écrit dans ce cas :

$$\sigma = \underset{\sim}{\sigma} : (\{n\} \otimes \{n\}) \tag{3.7}$$

$$\varepsilon = \underset{\sim}{\varepsilon} : (\{n\} \otimes \{n\}) \tag{3.8}$$

$$\text{avec : } \underset{\sim}{\sigma} = \underset{\approx}{C} : \underset{\sim}{\varepsilon} \quad \text{et} \quad \sigma = E\ \varepsilon$$

Dans le cas d'un essai de traction uniaxiale suivant $\{n\}$, on peut écrire :

$$\underset{\sim}{\sigma} = \sigma(\{n\} \otimes \{n\}) \tag{3.9}$$

$$\text{avec : } \sigma = E\ \varepsilon$$

On en déduit :

$$\frac{1}{E} = \underset{\approx}{C}^{-1} : \underset{\sim}{\mathcal{N}} : \underset{\sim}{\mathcal{N}} \tag{3.10}$$

avec :

$$\underset{\sim}{\mathcal{N}} = \{n\} \otimes \{n\} = \begin{pmatrix} sin^2(\varphi)cos^2(\theta) & sin^2(\varphi)cos(\theta)sin(\theta) & sin(\varphi)cos(\varphi)cos(\theta) \\ & sin^2(\varphi)sin^2(\theta) & sin(\varphi)cos(\varphi)sin(\theta) \\ sym & & cos^2(\varphi) \end{pmatrix} \tag{3.11}$$

En décomposant le tenseur d'élasticité cubique (cf. 2.1.3), on obtient une expression dont l'inverse est facilement exprimable :

$$\underset{\approx}{C}^{-1} = \frac{1}{3k}\underset{\approx}{K} + \frac{1}{2\mu'}\underset{\approx}{J'} + \frac{1}{2\mu''}\underset{\approx}{J''} \tag{3.12}$$

Ce qui nous donne :

$$\frac{1}{E} = \left(\frac{1}{9k} - \frac{1}{6\mu'}\right)\mathcal{N}_{ii}\,\mathcal{N}_{jj} + \left(\frac{1}{2\mu'} - \frac{1}{2\mu''}\right)\left(\mathcal{N}_{11}^2 + \mathcal{N}_{22}^2 + \mathcal{N}_{33}^2\right) + \frac{1}{2\mu''}\left(\mathcal{N}_{ij}\mathcal{N}_{kl}\right)$$

$$\frac{1}{E} = \left(\frac{1}{9k'} - \frac{1}{6\mu'}\right) + \left(\frac{1}{2\mu'} - \frac{1}{2\mu''}\right)\left(\mathcal{N}_{11}^2 + \mathcal{N}_{22}^2 + \mathcal{N}_{33}^2\right)$$

$$+ \frac{1}{2\mu''}\left[\left(\mathcal{N}_{11}^2 + \mathcal{N}_{22}^2 + \mathcal{N}_{33}^2\right) + 2\left(\mathcal{N}_{23}^2 + \mathcal{N}_{31}^2 + \mathcal{N}_{12}^2\right)\right]$$

On peut alors introduire les termes du tenseur $\underset{\sim}{\mathcal{N}}$ et simplifier les expressions. On remarque notamment que $\left[\left(\mathcal{N}_{11}^2 + \mathcal{N}_{22}^2 + \mathcal{N}_{33}^2\right) + 2\left(\mathcal{N}_{23}^2 + \mathcal{N}_{31}^2 + \mathcal{N}_{12}^2\right)\right] = 1$. Ceci conduit à :

$$\frac{1}{E} = \left(\frac{1}{9k} - \frac{1}{6\mu'}\right) + \left(\frac{1}{2\mu'} - \frac{1}{2\mu''}\right) f(\varphi,\theta) + \frac{1}{2\mu''} \tag{3.13}$$

$$\text{avec } f(\varphi,\theta) = sin^4(\varphi) + cos^4(\varphi) - 2sin^4(\varphi)sin^2(\theta)cos^2(\theta)$$

On note que dans le cas isotrope ($\mu = \mu' = \mu''$), le second terme s'annule et on retrouve la relation isotrope entre E et $\{k,\mu\}$ qui est indépendante de la direction de sollicitation. A partir de l'expression analytique (3.13), on peut donc évaluer la variation du module d'Young (Fig.3.1) suivant la direction de sollicitation en utilisant nos constantes d'élasticité (Tab.3.1).

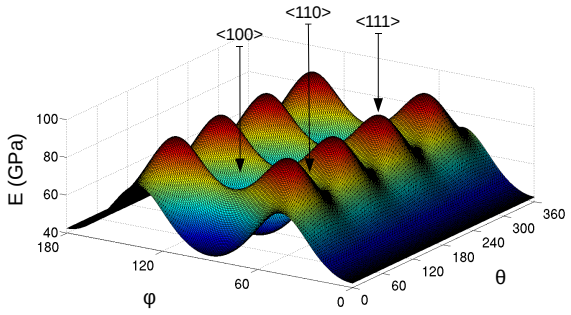


FIGURE 3.1 – Evolution du module d'Young d'un monocristal β (défini par les constantes d'élasticité de cette étude), en fonction des angles qui définissent la direction de sollicitation.

On distingue trois extremums sur la figure 3.1, dont les expressions peuvent être déterminées en dérivant $f(\varphi,\theta)$:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f(\varphi,\theta)}{\partial\theta} = sin^4(\varphi)sin(\theta)cos(\theta)cos(2\theta) = 0 \\ \dfrac{\partial f(\varphi,\theta)}{\partial\varphi} = cos(\varphi)sin(\varphi)\left(cos(2\varphi) + sin^2(\varphi)sin^2(\theta)cos^2(\theta)\right) = 0 \end{cases} \tag{3.14}$$

Il s'avère que les paires d'angles $\{\varphi,\theta\}$ solutions de ce système d'équations sont celles qui définissent les directions $<111>$, $<110>$ et $<100>$:

$$\begin{cases} f(\varphi,\theta) = \dfrac{1}{3} & \Rightarrow \quad E_{<111>} = \dfrac{9k'\mu''}{3k' + \mu''} \\ f(\varphi,\theta) = \dfrac{1}{2} & \Rightarrow \quad E_{<110>} = \dfrac{36k'\mu'\mu''}{4\mu'\mu'' + 3k'\mu'' + 9k'\mu'} \\ f(\varphi,\theta) = 1 & \Rightarrow \quad E_{<100>} = \dfrac{9k\mu'}{3k' + \mu'} \end{cases} \tag{3.15}$$

A partir de ces valeurs ($E_{<111>} > E_{<110>} > E_{<100>}$), on peut par exemple trouver l'amplitude du module d'Young pour un monocristal β, et ce pour toutes les constantes de la littérature (Tab.3.2). On constate que nos constantes d'élasticité donnent une variation maximale ΔE assez proche de celles qui proviennent de la littérature.

Référence	Constantes d'élasticité			Monocristal			Polycristal isotrope	
	C_{1111}	C_{1122}	C_{2323}	E_{max}	E_{min}	ΔE	E	ν
Présente étude	100	70	36	93.9	42.3	51.6	69.45	0.355
[Brandes et Brook, 1992] [Petry *et al.*, 1991]	134	110	55	142.8	34.8	108	86	0.38
[Reid *et al.*, 1973]	156.5	111.6	39.6	107.6	63.6	44	88.8	0.38
[Herbig, 2011]	153	101	57	147.4	72.7	74.7	112.5	0.34
[Ledbetter *et al.*, 2004]	97.7	82.7	37.5	98.5	21.9	76.6	57.6	0.39
[Fréour *et al.*, 2002]	174	116	41	111.7	81.2	30.5	98.6	0.38
[Fréour *et al.*, 2011]	167	115	44	118.8	73.2	45.6	98.5	0.38
[Tane *et al.*, 2008]	65.1	40.5	32.4	79.5	34	45.5	57.8	0.3
[Tane *et al.*, 2008]	90.8	55.9	35.8	91.3	48.2	43.1	71.5	0.32

TABLE 3.2 – Constantes d'élasticité pour la phase β en GPa, variation maximale du module d'Young pour le monocristal, et module d'Young et coefficient de Poisson pour un HEM isotrope.

3.1.3 Comportement viscoplastique de la phase β

Lorsque l'on observe la courbe de traction à une vitesse de $2.10^{-4}s^{-1}$ pour le Ti17 100% β (Fig.B.1.1), on constate un changement de pente aux alentours de 3% de déformation. Il s'agit de la précipitation induite sous contrainte de la phase α". L'apparition de cette phase a pour conséquence d'augmenter considérablement l'écrouissage : on ne peut donc pas se fier à ces courbes pour déterminer d'autres paramètres que ceux liés à la viscosité. On pourra par contre utiliser l'unique essai de traction sur le Ti5553 100% β (Fig.B.2.1) car, comme le montre le diffractogramme RX de l'éprouvette après traction (Fig.3.2), cette transformation de phase sous contrainte ne s'est pas produite au cours de cet essai.

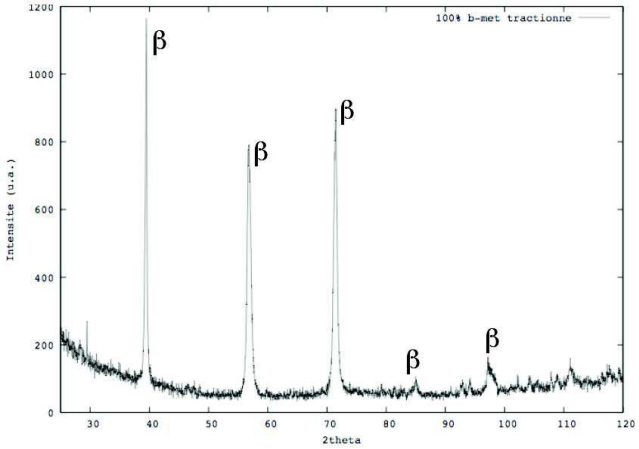


FIGURE 3.2 – Diffractogramme RX de l'éprouvette tractionnée (Ti5553 100% β) [Settefrati, 2012].

L'observation de la courbe de traction pour le Ti5553 100 % β permet de dire que le matériau présente un écrouissage faible et pratiquement linéaire entre 2% et 4%, après une période de transition à la sortie du domaine d'élasticité. En l'absence d'essai de fatigue à incorporer dans le modèle, on opte pour des lois de comportement en plasticité cristalline (cf. 2.3) comportant de l'écrouissage cinématique linéaire ($D = 0$) et pas d'écrouissage isotrope ($Q = b = 0$).

Pour identifier les paramètres de la fonction puissance caractérisant la viscosité du matériau, un agrégat de 100 ex-grains β, représenté par un unique point de Gauss, sera utilisé avec la loi de concentration de Berveiller-Zaoui (2.166). On cherchera à calibrer les valeurs de n et K en reproduisant les essais de traction réalisés sur le Ti17 100% β (Fig.3.3). Les autres paramètres ne sont pas représentatifs, on s'intéresse ici uniquement à l'écart en contrainte entre les deux vitesses, et ce avant l'apparition de la phase α".

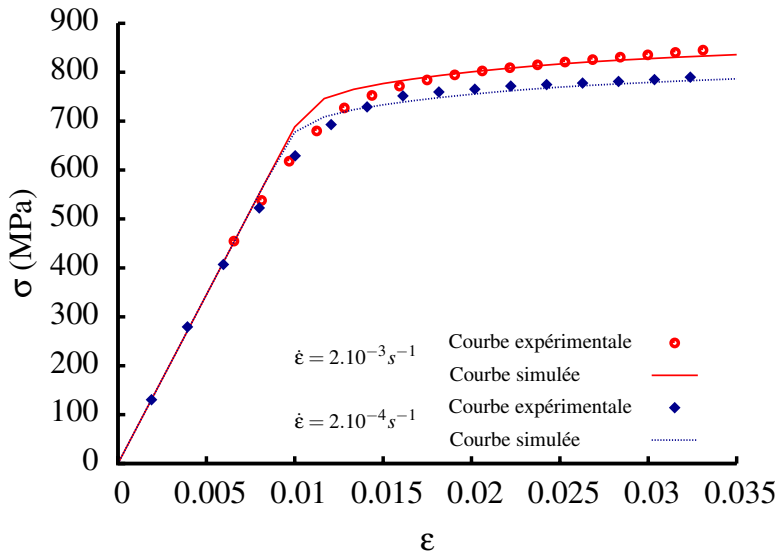


FIGURE 3.3 – Courbes simulées et expérimentales pour un agrégat de 100 ex-grains β en Ti17 100% β, $n = 20$, $K = 300$ MPa$^{1/n}$.

Les autres paramètres matériau sont identifiés au moyen de calculs par Élements Finis (EF) sur un agrégat périodique généré par un pavage de Voronoï et comprenant 100 grains (Fig.3.4). La réponse moyenne de l'agrégat EF est comparée à la courbe expérimentale σ–ε du Ti5553 100% β (Fig.3.5). L'élasticité sera soit considérée comme isotrope ($E = 69$ GPa, $\nu = 0.35$), soit décrite à l'échelle locale par les constantes d'élasticité cubique.

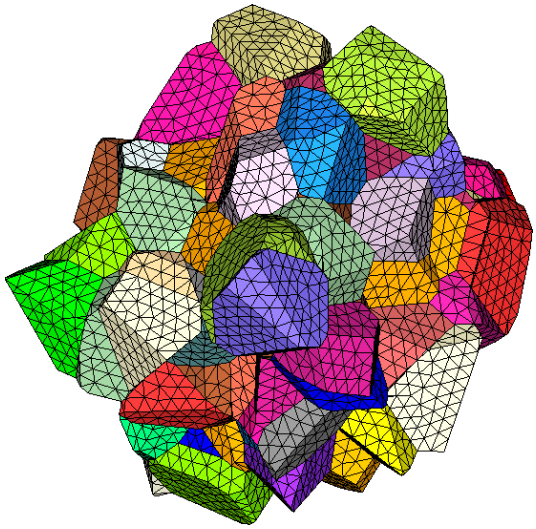


FIGURE 3.4 – Agrégat périodique de 100 grains généré par une méthode de Voronoï.

Chaque grain se voit assigner son propre tenseur d'élasticité (dans le cas élastique hétérogène) et ses propres tenseurs de Schmid, par rotation du tenseur d'élasticité non-orienté ($\underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_0$), tel que défini par ses constantes présentées dans le tableau 3.1, et du tenseur de Schmid non-orienté ($\underset{\sim}{m}^s_0$), tel que défini en (2.55), et alimenté par les systèmes de glissement représentatifs de la phase β (Tab.1.5) :

$$\underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_{\mathrm{I}} = \left(\underset{\sim}{R}_{\mathrm{I}} \underline{\otimes} \underset{\sim}{R}_{\mathrm{I}}\right) : \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_0 : \left(\underset{\sim}{R}_{\mathrm{I}} \underline{\otimes} \underset{\sim}{R}_{\mathrm{I}}\right)^T \tag{3.16}$$

$$\underset{\sim}{m}^s_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{R}_{\mathrm{I}} : \underset{\sim}{m}^s_0 : \underset{\sim}{R}^T_{\mathrm{I}} \tag{3.17}$$

Les tenseurs d'orientation $\underset{\sim}{R}_{\mathrm{I}}$ sont construits à partir des angles d'Euler (φ_1, ϕ, φ_2) qui définissent l'orientation cristallographique de chaque grain (3.18). Le tirage des orientations cristallines se fait de manière complètement aléatoire (cf. encadré ci-après).

$$\begin{pmatrix} \cos(\varphi_1)\cos(\varphi_2) - \sin(\varphi_1)\sin(\varphi_2)\cos(\phi) & -\cos(\varphi_1)\sin(\varphi_2) - \sin(\varphi_1)\cos(\varphi_2)\cos(\phi) & \sin(\varphi_1)\sin(\phi) \\ \sin(\varphi_1)\cos(\varphi_2) + \cos(\varphi_1)\sin(\varphi_2)\cos(\phi) & -\sin(\varphi_1)\sin(\varphi_2) + \cos(\varphi_1)\cos(\varphi_2)\cos(\phi) & -\cos(\varphi_1)\sin(\phi) \\ \sin(\varphi_2)\sin(\phi) & \cos(\varphi_2)\sin(\phi) & \cos(\phi) \end{pmatrix} \tag{3.18}$$

Procédure pour un tirage aléatoire des angles d'Euler [Morawiec, 2004]

1. Générer aléatoirement trois valeurs x_1, x_2 et x_3 comprises entre $[0,1]$;
2. Calculer $\varphi_i = 2\pi\ x_i \quad (i = 1,2)$ dans le domaine $[0, 2\pi]$;
3. Calculer $\phi = \arccos(2x_3 - 1)$ dans le domaine $[0, \pi]$.

Les paramètres matériau sont présentés dans le tableau 3.3. Ces derniers permettent d'obtenir des courbes simulées proches de celle qui a été obtenue expérimentalement (Fig.3.5)

	n	K $(MPa.s^{1/n})$	τ_c^s (MPa)	c (MPa)
{110}	20	300	113	200
{112}	20	300	113	200
{123}	20	300	123	400

TABLE 3.3 – Jeu de paramètres viscoplastiques pour la phase β

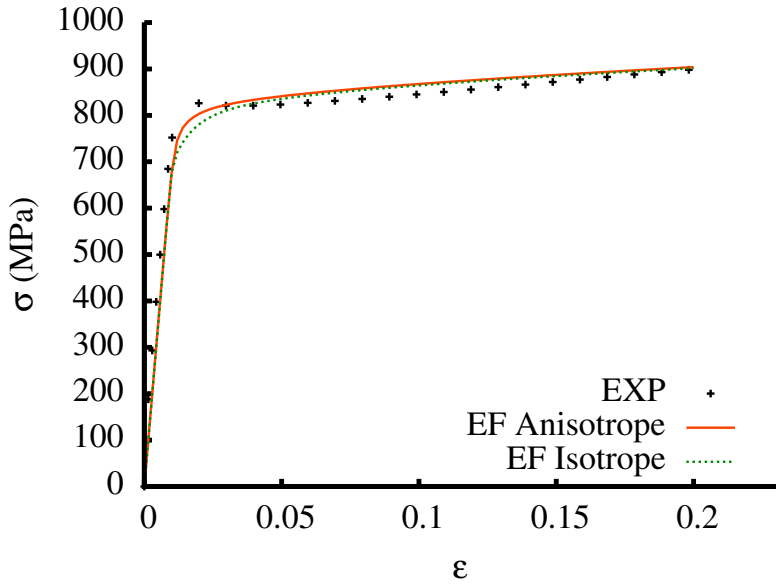


FIGURE 3.5 – Comparaison entre les courbes de traction uniaxiale simulées (agrégat EF - 100 grains) et la courbe expérimentale de [Duval, 2012].

Pour s'assurer de la représentativité de nos résultats, des calculs supplémentaires ont été effectués avec d'autres agrégats EF de 100 grains. Les résultats sont très similaires, ils présentent une dispersion inférieure à 1% sur la contrainte atteinte à $\varepsilon = 0.1$.

Ces calculs peuvent ensuite servir de référence pour comparer les différents modèles d'homogénéisation présentés en section 2.5. Pour cela, on fait en sorte de conserver les mêmes paramètres matériau (Tab.3.3), les mêmes orientations cristallines, et les mêmes rapports de volume entre grains. Une distinction sera faite entre les modèles basés sur l'élasticité uniforme isotrope (Fig.3.6a), et ceux qui tiennent compte de l'hétérogénéité élastique (Fig.3.6b). Tous les modèles sont implémentés en tant que "plugin" matériau dans le logiciel Z-Set/Zebulon [Transvalor et ENSMP, 2010]. Dans le cas particulier du modèle de Sabar et al., plusieurs entités seront à évaluer :

• l'expression des opérateurs sécants locaux : il s'avère qu'en plasticité cristalline, leur expression se déduit facilement, à l'instar de celle des opérateurs tangents locaux (2.75).

$$\underset{\sim}{B}_{\mathrm{I}} = \left[\frac{\partial \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_{\mathrm{I}}}{\partial \underset{\sim}{\sigma}_{\mathrm{I}}}\right]^{-1} = \left[\sum_s \frac{n}{K}\left\langle\frac{f^s}{K}\right\rangle^{n-1} \underset{\sim}{m}^s \otimes \underset{\sim}{m}^s\right]^{-1} \tag{3.19}$$

En pratique, l'inversion proposée dans l'expression précédente n'est pas possible du fait de la forme particulière du tenseur du quatrième ordre $(\underset{\sim}{m}^s \otimes \underset{\sim}{m}^s)$. Pour faciliter cette opération d'inversion, [Paquin *et al.*, 2001] propose d'ajouter un terme visco-élastique isotrope

négligeable dans l'expression. Notre expression (3.19) se transforme donc en :

$$\underset{\sim}{B}_{\mathrm{I}} = \left[\sum_s \frac{n}{K} \left\langle \frac{f^s}{K} \right\rangle^{n-1} \underset{\sim}{m}^s \otimes \underset{\sim}{m}^s + \left(2\mu^{ve} \underset{\sim}{J} + 3\lambda^{ve} \underset{\sim}{K} \right) \right]^{-1} \tag{3.20}$$

Dans le cadre de notre travail, les valeurs des modules visco-élastiques sont choisies de manière à ne pas influencer le comportement viscoplastique ($\mu^{ve} = 1.3\ 10^8$ MPa.s et $\lambda^{ve} = 7.5\ 10^8$ MPa.s).

• le tenseur d'élasticité effectif : ce dernier peut être calculé lors d'une étape préliminaire, par homogénéisation des propriétés élastiques locales. La formulation implicite proposée dans le modèle (2.184) est approchée par un processus itératif :

$$\underset{\sim}{C}_{n+1} = \left\langle \underset{\sim}{C}_{\mathrm{I}} : \left[\underset{\sim}{I} + \underset{\sim}{S} : \underset{\sim}{C}_n : \delta \underset{\sim}{c}_n \right]^{-1} \right\rangle \tag{3.21}$$

On prendra comme condition initiale un tenseur d'élasticité isotrope quelconque.

• lors de la simulation, l'opérateur sécant viscoplastique à l'instant t sera calculé à partir de celui du pas de temps précédent :

$$\underset{\sim}{B}_{[t]} = \left\langle \underset{\sim}{B}_{\mathrm{I}} : \left[\underset{\sim}{I} + \underset{\sim}{\Gamma}^B_{\mathrm{I}[t-\Delta t]} : \delta \underset{\sim}{b}_{[t-\Delta t]} \right]^{-1} \right\rangle \tag{3.22}$$

La valeur initiale de $\delta \underset{\sim}{b}$ est supposée nulle, ce qui signifie qu'au premier pas de la plasticité $\underset{\sim}{B} = \underset{\sim}{B}_{\mathrm{I}}$.

On étudie également le modèle de Hill avec des déformations élasto-viscoplastiques. Il s'agit d'un modèle de type auto-cohérent avec des lois de comportement locales élasto-viscoplastiques et une accommodation également élasto-viscoplastique. Pour plus de simplicité, ce modèle prendra la dénomination de modèle ACAVP. On rappelle que toutes les notations utilisées dans le manuscrit sont données en annexe (A.1). Dans ce modèle, l'opérateur tangent s'exprime suivant l'équation (2.75). Par ailleurs, le calcul implicite de l'opérateur tangent effectif sera également simplifié par une méthode itérative :

$$\underset{\sim}{L}^{eff}_{[t]} = \left\langle \underset{\sim}{L}_{\mathrm{I}} : \left[\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{S} : \left(\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{L}^{eff^{-1}}_{[t-\Delta t]} : \underset{\sim}{L}_{\mathrm{I}} \right) \right]^{-1} \right\rangle \tag{3.23}$$

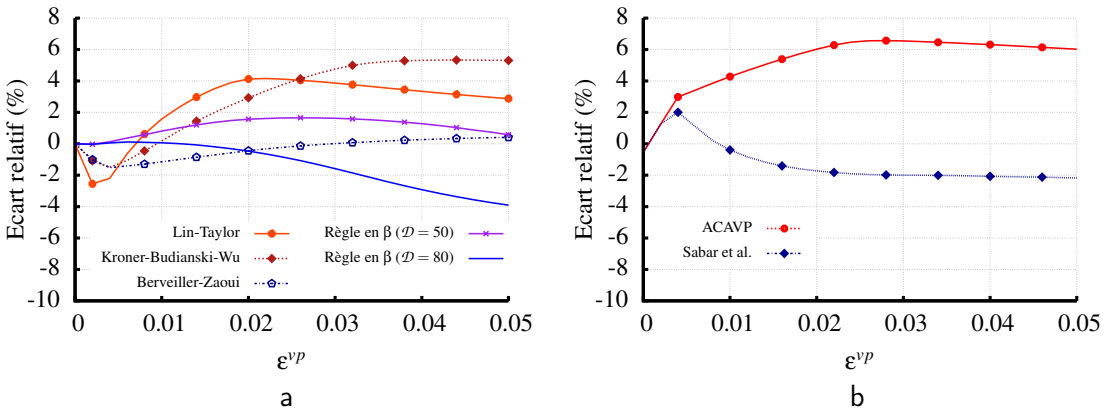


FIGURE 3.6 – Comparaison des différentes lois de concentration dans le cas de l'élasticité uniforme (ref. EF isotrope), et dans celui de l'élasticité hétérogène (ref. EF anisotrope).

Les résultats obtenus (Fig.3.6) sont en accord avec les analyses de la littérature : les modèles de type Lin-Taylor (2.127) et KBW (2.163) sont les plus rigides, tout comme le modèle ACAVP, ce qui est conforme avec le fait que l'opérateur choisi (2.75) ne représente pas l'accommodation viscoplastique : comme cela a été mentionné précédemment, il tend vers le tenseur d'élasticité local lorsque le pas de temps tend vers zéro.

D'autres modèles donnent des réponses plus acceptables : les modèles BZ (2.166) et de la règle en β (2.171) sont assez proches du calcul EF avec élasticité isotrope uniforme. On remarque la flexibilité de la règle en β, qui permet de moduler les contraintes internes grâce au coefficient $\mathcal{D}$. Le modèle de Sabar et al. (2.203) donne également de bons résultats.

On peut voir sur la figure 3.7 l'avantage des modèles de type Hill ou champs translatés, qui permettent de prédire également le comportement élastique local de chaque grain de l'agrégat. On notera enfin que les calculs à champs moyens nécessitent un temps de calcul CPU d'environ 2 000s contre 220 000s pour les calculs d'agrégat EF, soit un gain de temps d'un facteur 100.

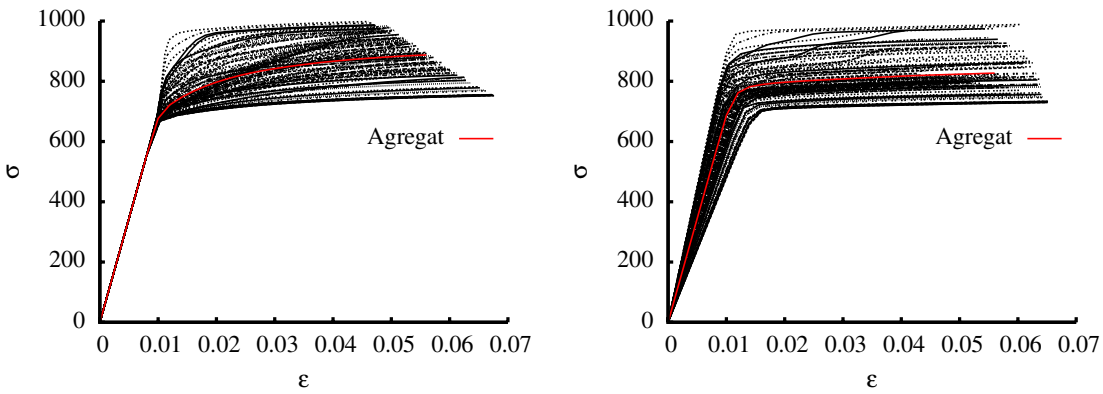


FIGURE 3.7 – Courbes contrainte – déformation pour chaque grain de l'agrégat, calculées pour le modèle de la règle en β et celui des champs translatés.

Les calculs présentés jusqu'à présent ont été effectués avec la méthode explicite de Runge-Kutta (Annexe C.1). On rappelle néanmoins que les θ-méthodes, qui permettent une résolution implicite sont également disponibles (Annexe C.2). Ces méthodes sont plus robustes mais plus longues en temps de calcul dans le cas où l'on traite un élément de volume. Leur avantage est qu'elles permettent de faire des plus grands pas en calcul de structure. Pour travailler en implicite avec les modèles à champs moyens, une simple adaptation des composantes du Jacobien, présenté en section 2.4, est nécessaire (cf. encadré).

Matrice Jacobienne dans un modèle à champs moyens

Pour faire des calculs d'homogénéisation en implicite, il faut considérer une matrice jacobienne comprenant toutes les variables de toutes les inclusions. On fait l'hypothèse que les variables d'une inclusion n'ont pas de connexion avec celles d'une autre inclusion. Dans ce cas, on peut reprendre les résidus et leurs dérivées présentés en section 2.4.1 pour le critère de von Mises, et en section 2.4.2 pour le critère de plasticité cristalline, en ne modifiant que le résidu $\mathfrak{R}_e$ de manière à introduire la transition d'échelle. Par exemple, pour le schéma auto-cohérent de Hill en plasticité von Mises, on peut écrire à la place de (2.76) :

$$\underset{\sim}{\mathfrak{R}}_e = \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e + \Delta p\ \underset{\sim}{n} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_{\mathrm{I}} : \Delta\underset{\sim}{E}$$

Si on s'intéresse à présent aux monocristaux β, on peut se focaliser sur les directions $<111>$ ($\varphi_1 = 45°$, $\Phi = 54.74°$, $\varphi_2 = 45°$), $<110>$ ($\varphi_1 = 0°$, $\Phi = 45°$, $\varphi_2 = 0°$) et $<100>$ ($\varphi_1 = 0°$, $\Phi = 0°$, $\varphi_2 = 0°$), qui étaient les extremums au niveau de l'élasticité. Les courbes reportées sur la Fig.3.8 montrent qu'en plasticité également la tendance reste la même : les grains β orientés $<111>$ sont les plus durs tandis que les grains $<100>$ sont les plus favorables à la déformation, la direction $<110>$ restant une orientation intermédiaire.

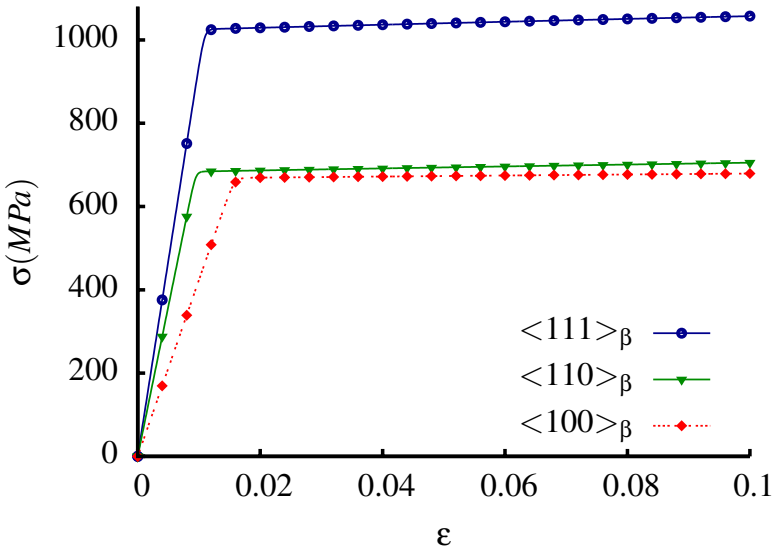


FIGURE 3.8 – Simulations de traction uniaxiale pour 3 monocristaux β d'orientations particulières, la loi de concentration utilisée est celle des champs translatés avec les paramètres matériau proposés dans la table 3.3.

3.1.4 Stratégie de modélisation du comportement α/β

Comme nous l'avons vu dans le chapitre 1, les microstructures biphasées des alliages de titane Ti17 et Ti5553 sont complexes. La manière de les approcher par des modèles d'homogénéisation tels que présentés dans la partie 2.5 n'est donc pas aussi triviale que dans le cas d'un polycristal classique. Pour simplifier le problème, la première hypothèse consiste à classer les précipités α par variants. Ainsi, on pourra considérer que chaque variant α est une inclusion dans le problème d'Eshelby (2.5.1). L'ensemble se composera donc de matrices

β, dont on supposera qu'elles ont toutes la même fraction volumique, et des variants α dont la fraction volumique sera attribuée aléatoirement et de manière à obtenir entre cinq et sept variants seulement par ex-grain β, ce qui est en accord avec les observations expérimentales (Fig.1.21 et Fig.1.26).

On fera l'hypothèse raisonnable que les matrices β peuvent être représentées par des inclusions sphériques. Pour les variants α, la morphologie sera sphérique pour les lois de concentration de type BZ (2.5.3) ou règle en β (2.5.4), afin de conserver une approche la plus simple possible. En revanche, pour les lois de concentration plus complexes, on fera intervenir le tenseur d'Eshelby, afin de se ramener au problème décrit ci-après (Fig.3.9). Les variants α auront une forme ellipsoïdale avec les rapports d'aspect calculés par [Settefrati, 2012] (cf. 1.14).

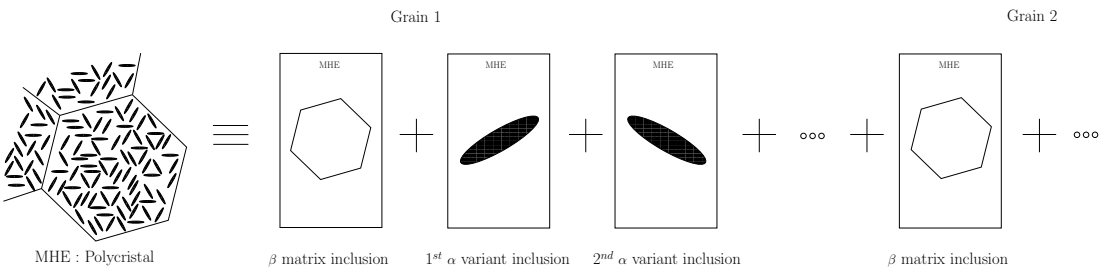


FIGURE 3.9 – Illustration des différentes inclusions considérées dans le modèle des champs translatés pour le Ti17 et le Ti5553

Il est évident que le fait de prendre plusieurs morphologies d'inclusion ne conduit pas à un terme d'accommodation unique dans les lois de concentration, et que par conséquent le postulat énoncé au travers des équations (2.135-2.137) n'est plus valable. Cet écart à l'auto-cohérence sera évalué par la suite. Il est également important de signaler que la morphologie nodulaire du Ti5553 ne sera pas prise en compte. Afin de limiter le nombre de variables dans les modèles, on fera l'approximation que les variants α tels qu'ils sont décrits dans la Fig.3.9 représentent à la fois les précipités lamellaires et les nodules. Le comportement mécanique attribué aux variants α sera donc un mélange entre le comportement des nodules et de celui des fines lamelles.

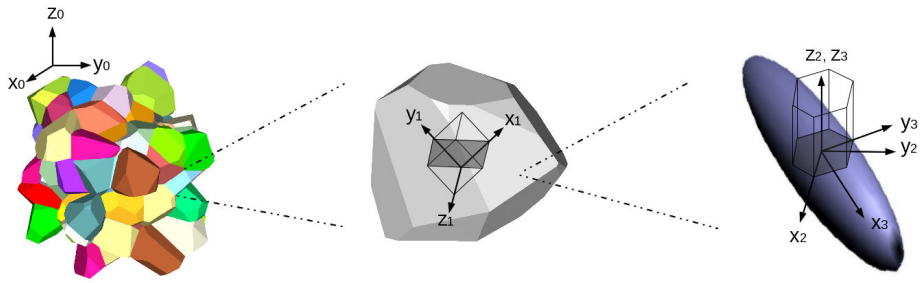


FIGURE 3.10 – Rotations successives permettant de passer de la base macroscopique à la base géométrique d'un variant α

Les transitions entre les différentes échelles décrites dans les modèles font intervenir trois rotations (Fig.3.10) :

- Le passage de la base macroscopique à la base de l'ex-grain β se fait au moyen de la rotation $\underset{\sim}{R}_1$, qui est construit, comme on l'a expliqué précédemment, à partir des angles d'Euler qui décrivent l'orientation cristalline de l'ex-grain β considéré. C'est donc dans cette base que l'on définira les variables liées aux matrices cubiques β.

- La rotation de la base de l'ex-grain β à celle d'un des variants α qu'il contient se fait par $\underset{\sim}{R}_2$, défini à partir des angles d'Euler garants des relations de Burgers (Tab.1.1). C'est dans cette base que l'on définira le comportement du variant α. Il est important de noter que l'on négligera les désorientations observées dans la littérature (Fig.1.9).

- Enfin, une dernière rotation ($\underset{\sim}{R}_3$) peut être importante : celle qui relie l'orientation cristallographique, telle que l'on vient de la définir, à l'orientation morphologique. Pour cela, on va simplifier le problème en prenant $\{111\}_\beta$ comme plan d'habitat et non $\{334\}_\beta$ comme cela a été déterminé dans la littérature (Fig.1.13). Dans ce cas, une rotation de 45° autour de l'axe z_2 est suffisante pour passer de la base du réseau hexagonal à celle de l'ellipsoïde. Cette dernière base a de l'importance pour le calcul des tenseurs d'Eshelby et des tenseurs de Green modifiés.

3.1.5 Comportement élastique de la phase α

Pour identifier les constantes d'élasticité de la phase α, on se base d'une part sur celles de la phase β, et d'autre part sur les modules d'Young mesurés expérimentalement pour différentes microstructures biphasées de Ti17 et Ti5553 avec des fractions de phases α très variables (Ti5553 : MD, 45 et 55 – Ti17 : Snecma, 7a30, 2a60a - cf. Tab.1.9 et Tab.1.7). De la même manière que pour la phase β, on prendra des constantes d'élasticité proportionnelles à celles de la littérature (Tab.1.2), ce qui permet d'avoir un facteur d'anisotropie équivalent (2.23). Pour vérifier que nos constantes d'élasticité conduisent bien aux mêmes modules d'Young que ceux mesurés expérimentalement, la loi de concentration de Hill est utilisée dans le cas purement élastique (3.24). Pour plus de simplicité, la formulation implicite est remplacée par une approche incrémentale.

$$\underset{\sim}{\Lambda}^{eff}_{n+1} = \left\langle \underset{\sim}{C}_{\mathrm{I}} : \underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}} \right\rangle = \left\langle \underset{\sim}{C}_{\mathrm{I}} : \left[\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{S}_{\mathrm{I}} : \left(\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{\Lambda}^{eff^{-1}}_{n} : \underset{\sim}{C}_{\mathrm{I}} \right) \right]^{-1} \right\rangle \tag{3.24}$$

On suppose que notre système biphasé comporte un grand nombre de grains β transformé et que par conséquent l'élasticité effective de l'agrégat est isotrope. On introduit également, comme cela avait été mentionné dans l'introduction 3.1.4, plusieurs tenseurs d'Eshelby. En notant Ngrain le nombre d'ex-grains β et Nvar le nombre de variants α par ex-grain β, les rotations appliquées aux tenseurs caractéristiques des deux phases sont donc :

• Phase β (Ngrain)

$$\underset{\sim}{C}_{\mathrm{I}} = \left(\underset{\sim}{R}_1 \underline{\otimes} \underset{\sim}{R}_1\right) : \underset{\sim}{C}_{\beta} : \left(\underset{\sim}{R}_1 \underline{\otimes} \underset{\sim}{R}_1\right)^T \tag{3.25}$$

$$\underset{\sim}{S}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{S}_{\beta} \tag{3.26}$$

• Phase α (Ngrain x Nvar)

$$\underset{\sim}{C}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{R}_{21} : \underset{\sim}{C}_{\alpha} : \underset{\sim}{R}^T_{21} \quad \text{avec} \quad \underset{\sim}{R}_{21} = \left[\left(\underset{\sim}{R}_2 \cdot \underset{\sim}{R}_1\right) \underline{\otimes} \left(\underset{\sim}{R}_2 \cdot \underset{\sim}{R}_1\right)\right] \tag{3.27}$$

$$\underset{\sim}{S}_{\mathrm{I}} = \underset{\sim}{R}_{321} : \underset{\sim}{S}_{\alpha} : \underset{\sim}{R}^T_{321} \quad \text{avec} \quad \underset{\sim}{R}_{321} = \left[\left(\underset{\sim}{R}_3 \cdot \underset{\sim}{R}_2 \cdot \underset{\sim}{R}_1\right) \underline{\otimes} \left(\underset{\sim}{R}_3 \cdot \underset{\sim}{R}_2 \cdot \underset{\sim}{R}_1\right)\right] \tag{3.28}$$

où $\underset{\sim}{C}_\alpha$ et $\underset{\sim}{C}_\beta$ sont les expressions des tenseurs d'élasticité dans le repère matériau, et $\underset{\sim}{S}_\alpha$ et $\underset{\sim}{S}_\beta$ sont les tenseurs d'Eshelby dans les cas respectifs d'une inclusion ellipsoïdale aplatie et d'une inclusion sphérique dans un HEM élastique isotrope. Les tenseurs d'Eshelby peuvent être calculés à partir de l'intégration numérique présentée en (D.13), ou bien par les versions analytiques présentées dans le cas du HEM isotrope (E.3 et E.2.1).

La moyenne auto-cohérente se traite de manière à rendre compte des deux transitions d'échelle : toute variable effective X se calcule à partir de ses valeurs locales associées (y_1) de la manière suivante :

$$\text{Macroscopique} \qquad X = \langle y_1 \rangle = \sum_{g}^{\text{Ngrain}} \zeta_g y^g \tag{3.29}$$

$$\text{Ex-grain } \beta \qquad y^g = \zeta_\alpha \left\langle y_i^g \right\rangle_v + (1-\zeta_\alpha) y_0^g \tag{3.30}$$

$$\text{Variants } \alpha \text{ (i=1..Nvar)} \qquad \left\langle y_i^g \right\rangle_v = \sum_{i}^{\text{Nvar}} \zeta_i y_i^g \tag{3.31}$$

où ζ_g est la fraction volumique de chaque grain β transformé. Elle vaut dans ce cas précis $\zeta_g = 1/\text{Ngrain}$, puisque toutes les orientations cristallographiques pour les ex-grains β sont équiprobables. La constante ζ_α est la fraction de phase α dans le matériau considéré. Enfin, la fraction volumique ζ_i caractérise la présence de chaque variant α au sein d'un ex-grain β.

Les constantes d'élasticité choisies pour les deux phases sont présentées dans le tableau 3.4. Ces constantes permettent d'obtenir des modules d'Young raisonnablement proches de ceux mesurés expérimentalement pour les microstructures d'étude (Tab.3.5). Le calcul se fait sur un agrégat de 4000 ex-grains β avec 5 à 7 variants α pour chaque ex-grain.

	C_{1111}	C_{1122}	C_{1133}	C_{3333}	C_{2323}
$\underset{\sim}{C}_\alpha$	219	124	93	243	63.5
$\underset{\sim}{C}_\beta$	100	70	70	100	36

TABLE 3.4 – Constantes élastiques pour les phases α et β (GPa).

Alliage	Ti5553	Ti17	Ti5553	Ti17	Ti5553	Ti17	Ti5553	Ti17
$\%\alpha$	0.	0.	15.5	33.	50.	50.	60.	70.
E_{exp} (GPa)	67.8	60.	84.	84.5	105.5	109.	119.	127.
E_{sim} (GPa)	69.		82.4	95.8	109.7		118.4.	127.4
ν_{sim}	0.35		0.34	0.33	0.32		0.32	0.31

TABLE 3.5 – Comparaison entre les modules d'Young obtenus par simulation sur agrégat de 4000 grains et ceux mesurés à partir des courbes expérimentales de traction uniaxiale.

On remarque que les constantes d'élasticité attribuées à la phase α sont sensiblement plus élevées que celles que l'on peut trouver dans la littérature (Tab.1.2) pour des alliages de titane α. Cet écart, comme celui observé précédemment pour les constantes élastiques de la phase β, peut s'expliquer par la différence de composition chimique. Néanmoins, les différences de composition chimique entre le Ti17 et le Ti5553 ne justifient pas de prendre deux jeux de constantes élastiques. On note également que le coefficient de Poisson est

proche de 0.3, ce qui est courant pour les alliages métalliques.

Pendant le calcul, on a pu s'intéresser à la convergence de la méthode itérative, et on a pu ainsi s'assurer que la prise en compte de plusieurs tenseurs d'Eshelby n'affectait pas trop l'auto-cohérence. En prenant un tenseur d'élasticité isotrope et quelconque pour la première itération ($\underset{\sim}{\underset{\sim}{\Lambda}}^{eff}_{n=0}$), on a pu suivre l'évolution du coefficient de Poisson par rapport à la valeur initiale fixée à 0.3, et celle du coefficient de Zener (2.23), qui doit rester constant et égal à l'unité puisque l'agrégat est supposé isotrope. L'écart à l'auto-cohérence est évalué au travers des tenseurs de localisation (3.32), dont l'homogénéisation doit permettre de redonner l'identité.

$$\left\langle \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_{\mathrm{I}} \right\rangle = \left\langle \left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{I}} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{S}}_{\mathrm{I}} : \left(\underset{\sim}{\underset{\sim}{I}} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{\Lambda}}^{eff^{-1}} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_{\mathrm{I}} \right) \right]^{-1} \right\rangle = \underset{\sim}{\underset{\sim}{I}} \tag{3.32}$$

On suivra donc l'erreur par rapport à l'identité du quatrième ordre, ce qui peut être fait par :

$$e_A = \sqrt{\sum_i (1 - A_{iiii})^2 + \sum_{ij} (1 - 2A_{ijij})^2} \tag{3.33}$$

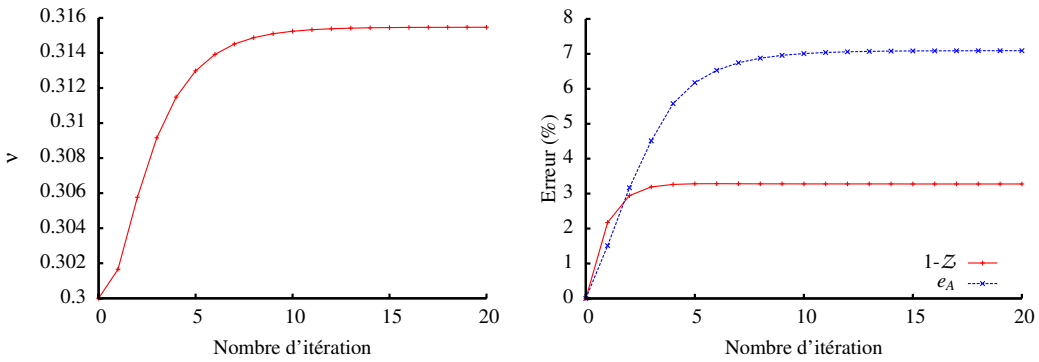


FIGURE 3.11 – A gauche : convergence de la valeur du coefficient de Poisson. A droite : évolution du pourcentage d'erreur vis-à-vis de l'auto-cohérence (e_A) et de l'isotropie du polycristal ($\mathcal{Z} = 1$). L'alliage étudié ici est le Ti17 Snecma.

On remarque que les valeurs suivies convergent assez rapidement, ce qui tend à conforter notre approximation de l'expression implicite (3.24). L'homogénéisation élastique sur les 4000 grains β transformé de l'agrégat donne une symétrie isotrope à 2% près. Enfin, on estimera comme acceptable l'écart de 7% par rapport à l'identité du quatrième ordre obtenu pour e_A.

Le fait d'avoir pris des constantes d'élasticité pour la phase α approximativement proportionnelles à celles de [Brandes et Brook, 1992] [Petry *et al.*, 1991] permet de retrouver la même évolution à un facteur près (Fig.3.12) du module d'Young d'un monocristal α en fonction de la désorientation entre son axe $\underline{\mathbf{c}}$ et l'axe de traction. Il est à noter que cette étude avait été proposée initialement par [Zarkades et Larson, 1970].

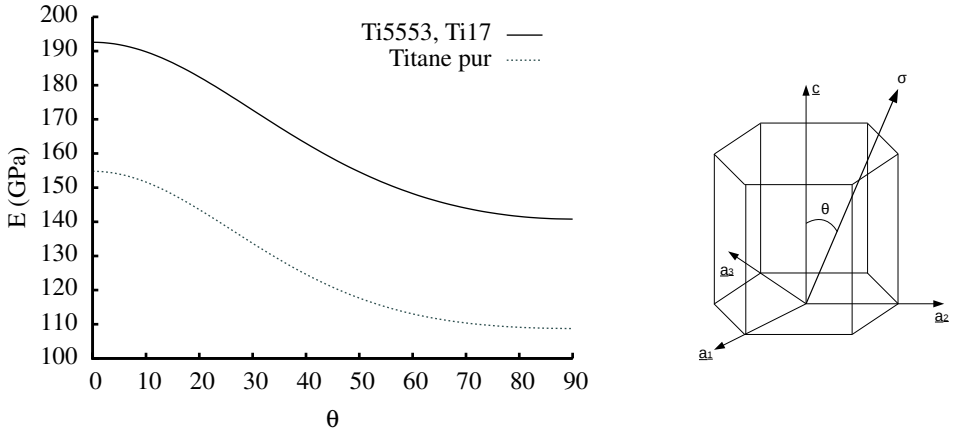


FIGURE 3.12 – Module d'Young d'un monocristal α en fonction de l'angle de désorientation entre l'axe de sollicitation et l'axe c de la structure hcp. Résultats obtenus pour un jeu de constantes élastiques de la littérature [Brandes et Brook, 1992] [Petry *et al.*, 1991] et celui que nous avons identifié pour le Ti17 et le Ti5553.

3.1.6 Comportement viscoplastique α/β

Pour évaluer les paramètres matériau, on se basera sur les remarques faites dans l'introduction 3.1.4 et sur l'analyse des modèles à champs moyens qui a été proposée pour le comportement du monocristal β (Fig.3.6). Pour ce type de microstructures, un calcul EF portant sur une géométrie explicite est à proscrire, du fait de la grande taille et de la finesse du maillage qu'il serait nécessaire d'avoir.

On utilisera donc deux modèles à champs moyens spécifiquement adaptés pour les microstructures biphasées α/β. Le premier, basé sur l'hypothèse de l'inclusion sphérique et sur celle de l'élasticité isotrope, est un modèle de type règle en β avec deux transitions d'échelle. Le second, plus complet, sera une adaptation particulière du modèle de Sabar et al. que l'on appellera à présent modèle des champs translatés pour plus de confort dans la notation. Les algorithmes de ces deux modèles spécifiquement conçus pour les alliages de titane β-métastable sont donnés dans la suite de cette section (p.75 et p.76). Les simulations des différents essais mécaniques se feront sur un point de Gauss, représentant un agrégat composé de 50 ex-grains β. Par ailleurs, pour chaque essai simulé, trois agrégats différents sont testés afin de s'assurer de la représentativité de la réponse en déformation.

Pour le modèle des champs translatés, on conserve les tenseurs d'Eshelby $\underset{\sim}{S}_\alpha$ et $\underset{\sim}{S}_\beta$ introduits dans le modèle de Hill en élasticité (3.28), afin de prendre en compte la différence de morphologies entre les deux phases. Etant donné que le tenseur d'Eshelby est directement relié au tenseur de Green modifié $\underset{\sim}{\Gamma}_1^C$ par l'équation (2.194), on note :

- Phase β (Ngrain)

$$\underset{\sim}{\Gamma}_1^C = \underset{\sim}{\Gamma}_{1\beta}^C = \underset{\sim}{S}_\beta : \underset{\sim}{C} \tag{3.34}$$

- Phase α (Ngrain x Nvar)

$$\underset{\sim}{\Gamma}_1^C = \underset{\sim}{R}_{321} : \underset{\sim}{\Gamma}_{1\alpha}^C : \underset{\sim}{R}_{321}^T = \underset{\sim}{R}_{321} : \underset{\sim}{S}_\alpha : \underset{\sim}{C} : \underset{\sim}{R}_{321}^T \tag{3.35}$$

On rappelle que le fait de prendre plusieurs morphologies dans le schéma auto-cohérent a

conduit à une erreur acceptable dans le cadre du modèle de Hill en élasticité (Fig.3.11). On suppose par ailleurs que la morphologie d'inclusion influence beaucoup plus l'élasticité que la plasticité. En conséquence, dans la partie viscoplastique du modèle des champs translatés, on fait le choix de prendre un tenseur de Green $\underset{\sim}{\Gamma}_1^B$ unique, en traitant toutes les inclusions de manière sphérique.

Comme cela a été mentionné précédemment, on présente les algorithmes de manière à faire apparaître les changements d'échelle. Si dans nos modèles, la localisation des contraintes se fait de manière directe, sans passer par l'échelle des ex-grains β, la moyenne auto-cohérente est traitée en deux étapes (cf. (3.31)). Dans les algorithmes développés ci-après, on ajoute un indice g aux variables locales afin de spécifier l'ex-grain β dans lequel on travaille. Pour chacun d'entre eux, on assigne également un indice i allant de 0 à Nvar. On rappelle que Nvar est le nombre de variants α tirés aléatoirement pour l'ex-grain β en question, et l'indice $i = 0$ correspond à la matrice β du grain β transformé g.

Dans le modèle de la règle en β, on se sert de la loi de concentration pour calculer la contrainte locale à partir de la contrainte macroscopique. La loi de comportement permet ensuite de calculer les vitesses de déformation viscoplastique locale et celles des termes non-linéaires $\underset{\sim}{\beta}_1$. Une première moyenne auto-cohérente est ensuite utilisée pour calculer les variables à l'échelle des ex-grains β ($\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{vp^g}$, $\dot{\underset{\sim}{\beta}}^g$). La seconde moyenne permet de calculer les variables effectives ($\underset{\sim}{\mathcal{B}}$, $\underset{\sim}{\Sigma}$), ce qui permet d'obtenir au pas de temps suivant les entités nécessaires pour la loi de concentration.

Dans le modèle des champs translatés, la loi de concentration n'est pas utilisée directement car cette dernière doit être exprimée en vitesse. On emploie donc la relation d'élasticité pour le calcul de la contrainte locale. On note par ailleurs que l'élasticité effective de l'agrégat biphasé sera évaluée dans une procédure itérative antérieure au calcul (3.21). Lorsque la contrainte locale est connue, on a la possibilité de calculer la vitesse de déformation viscoplastique de chaque inclusion grâce à la loi de comportement. Les opérateurs viscoplastiques locaux peuvent aussi être déterminés en utilisant l'expression (3.19).
A partir de ces variables, et en se basant sur la formulation incrémentale présentée en (3.22), on peut déterminer par auto-cohérence l'opérateur sécant viscoplastique $\underset{\approx}{\mathcal{B}}$. On utilise ensuite la notation introduite dans l'équation (2.205), pour calculer la vitesse de déformation viscoplastique macroscopique. Cette dernière nous permettra, au travers de l'équation (2.202), de calculer les vitesses de déformation élastique locale qui sont nécessaires au pas de temps suivant pour déterminer les contraintes locales.

Algorithme : Règle en β (Plasticité cristalline)

<u>Variant α</u> $\quad (i = 1..\text{Nvar})$

$$\underset{\sim}{\sigma}_i^g = \underset{\sim}{\Sigma} + 2\mu(1-\beta)\left(\underset{\sim}{\mathcal{B}} - \underset{\sim}{\beta}_i^g\right)$$

$$\tau^s = \underset{\sim}{\sigma}_i^g : \left[\underset{\sim}{R}_{21} : \underset{\sim}{m}_\alpha^s : \underset{\sim}{R}_{21}^T\right]$$

$$\dot{\upsilon}^s = \left\langle \frac{\mid \tau^s - x^s \mid - r^s}{K} \right\rangle^n$$

$$\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_i^{vp^g} = \sum_s^{N_s} \dot{\upsilon}^s \eta^s \left[\underset{\sim}{R}_{21} : \underset{\sim}{m}_\alpha^s : \underset{\sim}{R}_{21}^T\right]$$

$$\dot{\beta}_i^g = \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_i^{vp^g} - \mathcal{D}_\alpha \ \underset{\sim}{\beta}_i^g \parallel \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_i^{vp^g} \parallel$$

<u>Matrice β</u> $\quad (i = 0)$

$$\underset{\sim}{\sigma}_0^g = \underset{\sim}{\Sigma} + 2\mu(1-\beta)\left(\underset{\sim}{\mathcal{B}} - \underset{\sim}{\beta}_0^g\right)$$

$$\tau^s = \underset{\sim}{\sigma}_0^g : \left[\underset{\sim}{R}_1 : \underset{\sim}{m}_\beta^s : \underset{\sim}{R}_1^T\right]$$

$$\dot{\upsilon}^s = \left\langle \frac{\mid \tau^s - x^s \mid - r^s}{K} \right\rangle^n$$

$$\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_0^{vp^g} = \sum_s^{N_s} \dot{\upsilon}^s \eta^s \left[\underset{\sim}{R}_1 : \underset{\sim}{m}_\beta^s : \underset{\sim}{R}_1^T\right]$$

$$\dot{\beta}_0^g = \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_0^{vp^g} - \mathcal{D}_\beta \ \underset{\sim}{\beta}_0^g \parallel \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_0^{vp^g} \parallel$$

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{vp^g} = \zeta_\alpha \left(\sum_i^{\text{Nvar}} \zeta_i \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_i^{vp^g} \right) + (1-\zeta_\alpha) \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_0^{vp^g} \quad \Rightarrow \quad \dot{\underset{\sim}{E}}^{vp} = \sum_g^{\text{Ngrain}} \zeta_g \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{vp^g}$$

$$\underset{\sim}{\beta}^g = \zeta_\alpha \left(\sum_i^{\text{Nvar}} \zeta_i \underset{\sim}{\beta}_i^g \right) + (1-\zeta_\alpha) \underset{\sim}{\beta}_0^g \quad \Rightarrow \quad \underset{\sim}{\mathcal{B}} = \sum_g^{\text{Ngrain}} \zeta_g \underset{\sim}{\beta}^g$$

$$\underset{\sim}{\Sigma} = \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}} : \left(\underset{\sim}{E} - \underset{\sim}{E}^{vp}\right)$$

Algorithme : Champs translatés (Plasticité cristalline)

Variant α $(i = 1..\text{Nvar})$	Matrice β $(i = 0)$
$\underset{\sim}{\sigma}_i^g = \underset{\sim}{C}_i^g : \underset{\sim}{\varepsilon}_i^{eg}$ avec $\underset{\sim}{C}_i^g = \left[\underset{\sim}{R}_{21} : \underset{\sim}{C}_\alpha : \underset{\sim}{R}_{21}^T\right]$	$\underset{\sim}{\sigma}_0^g = \underset{\sim}{C}_0^g : \underset{\sim}{\varepsilon}_0^{eg}$ avec $\underset{\sim}{C}_0^g = \left[\underset{\sim}{R}_1 : \underset{\sim}{C}_\beta : \underset{\sim}{R}_1^T\right]$
$\tau^s = \underset{\sim}{\sigma}_i^g : \underset{\sim}{m}_i^s$ avec $\underset{\sim}{m}_i^s = \left[\underset{\sim}{R}_{21} : \underset{\sim}{m}_\alpha^s : \underset{\sim}{R}_{21}^T\right]$	$\tau^s = \underset{\sim}{\sigma}_0^g : \underset{\sim}{m}_0^s$ avec $\underset{\sim}{m}_0^s = \left[\underset{\sim}{R}_1 : \underset{\sim}{m}_\beta^s : \underset{\sim}{R}_1^T\right]$
$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_i^{vpg} = \sum_{s\in i}^{N_s} \dot{\upsilon}^s \eta^s \underset{\sim}{m}_i^s$ avec $\dot{\upsilon}^s = \left\langle \frac{\mid \tau^s - x^s \mid - r^s}{K} \right\rangle^n$	$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_0^{vpg} = \sum_{s\in 0}^{N_s} \dot{\upsilon}^s \eta^s \underset{\sim}{m}_0^s$ avec $\dot{\upsilon}^s = \left\langle \frac{\mid \tau^s - x^s \mid - r^s}{K} \right\rangle^n$
$\underset{\sim}{B}_i^{g^{-1}} = \sum_{s\in i}^{N_s} \frac{n}{K} \left\langle \frac{\lvert\tau^s - x^s\rvert - r^s}{K} \right\rangle^{n-1} \underset{\sim}{m}_i^s \otimes \underset{\sim}{m}_i^s$	$\underset{\sim}{B}_0^{g^{-1}} = \sum_{s\in 0}^{N_s} \frac{n}{K} \left\langle \frac{\lvert\tau^s - x^s\rvert - r^s}{K} \right\rangle^{n-1} \underset{\sim}{m}_0^s \otimes \underset{\sim}{m}_0^s$

$$\underset{\sim}{B}^g = \zeta_\alpha \left(\sum_i^{\text{Nvar}} \zeta_i \underset{\sim}{B}_i^g : \left[\underset{\sim}{I} + \underset{\sim}{\Gamma}_1^{B(t-\Delta t)} : \delta \underset{\sim}{b}_i^g(t-\Delta t) \right]^{-1} \right) + (1-\zeta_\alpha)\ \underset{\sim}{B}_0^g : \left[\underset{\sim}{I} + \underset{\sim}{\Gamma}_1^{B(t-\Delta t)} : \delta \underset{\sim}{b}_0^g(t-\Delta t) \right]^{-1} \quad \Rightarrow \quad \underset{\sim}{B} = \sum_g^{\text{Ngrain}} \zeta_g \underset{\sim}{B}^g$$

$\delta \underset{\sim}{b}_i^g = \underset{\sim}{B}_i^g - \underset{\sim}{B}$	$\delta \underset{\sim}{b}_0^g = \underset{\sim}{B}_0^g - \underset{\sim}{B}$
$\underset{\sim}{A}_i^{Bg} = \left[\underset{\sim}{I} + \underset{\sim}{\Gamma}_1^B : \delta \underset{\sim}{b}_i^g \right]^{-1}$, $\underset{\sim}{A}_i^{Cg} = \left[\underset{\sim}{I} + \left(\underset{\sim}{R}_{321} : \underset{\sim}{\Gamma}_{1\alpha}^C : \underset{\sim}{R}_{321}^T \right) \left(\underset{\sim}{C}_i^g - \underset{\sim}{C} \right) \right]^{-1}$	$\underset{\sim}{A}_0^{Bg} = \left[\underset{\sim}{I} + \underset{\sim}{\Gamma}_1^B : \delta \underset{\sim}{b}_0^g \right]^{-1}$, $\underset{\sim}{A}_0^{Cg} = \left[\underset{\sim}{I} + \underset{\sim}{\Gamma}_{1\beta}^C \left(\underset{\sim}{C}_0^g - \underset{\sim}{C} \right) \right]^{-1}$

$$\left.\begin{array}{l} \underset{\sim}{M}^g = \zeta_\alpha \left(\sum_i^{\text{Nvar}} \zeta_i\ \underset{\sim}{A}_i^{Cg} : \left(\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{R}_{321} : \underset{\sim}{S}_\alpha : \underset{\sim}{R}_{321}^T \right) : \underset{\sim}{A}_i^{Bg} \right) + (1-\zeta_\alpha)\ \underset{\sim}{A}_0^{Cg} : \left(\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{S}_\beta \right) : \underset{\sim}{A}_0^{Bg} \quad \Rightarrow \quad \underset{\sim}{M} = \sum_g^{\text{Ngrain}} \zeta_g\ \underset{\sim}{M}^g \\ \underset{\sim}{d}^g = \zeta_\alpha \left(\sum_i^{\text{Nvar}} \zeta_i\ \underset{\sim}{A}_i^{Cg} : \left(\underset{\sim}{R}_{321} : \underset{\sim}{\Gamma}_{1\alpha}^C : \underset{\sim}{R}_{321}^T \right) : \underset{\sim}{C}_i^g : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_i^{vpg} \right) + (1-\zeta_\alpha)\ \underset{\sim}{A}_0^{Cg} : \underset{\sim}{\Gamma}_{1\beta}^C : \underset{\sim}{C}_0^g : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_0^{vpg} \quad \Rightarrow \quad \underset{\sim}{d} = \sum_g^{\text{Ngrain}} \zeta_g\ \underset{\sim}{d}^g \end{array}\right\} \quad \dot{\underset{\sim}{E}}^{vp} = \left[\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{M} \right]^{-1} : \underset{\sim}{d}$$

$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_i^g = \underset{\sim}{A}_i^{Cg} : \left(\dot{\underset{\sim}{E}}^e + \underset{\sim}{A}_i^{Bg} : \dot{\underset{\sim}{E}}^{vp} \right) + \underset{\sim}{A}_i^{Cg} : \left(\underset{\sim}{R}_{321} : \underset{\sim}{\Gamma}_{1\alpha}^C : \underset{\sim}{R}_{321}^T \right) : \left(\underset{\sim}{C}_i^g : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_i^{vpg} - \underset{\sim}{C} : \underset{\sim}{A}_i^{Cg} : \dot{\underset{\sim}{E}}^{vp} \right)$	$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_0^g = \underset{\sim}{A}_0^{Cg} : \left(\dot{\underset{\sim}{E}}^e + \underset{\sim}{A}_0^{Bg} : \dot{\underset{\sim}{E}}^{vp} \right) + \underset{\sim}{A}_0^{Cg} : \underset{\sim}{\Gamma}_{1\beta}^C : \left(\underset{\sim}{C}_0^g : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_0^{vpg} - \underset{\sim}{C} : \underset{\sim}{A}_0^{Cg} : \dot{\underset{\sim}{E}}^{vp} \right)$
$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_i^{eg} = \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_i^g - \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_i^{vpg}$	$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_0^{eg} = \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_0^g - \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_0^{vpg}$

Pour identifier les paramètres matériau des modèles, plusieurs essais expérimentaux sont disponibles : des essais de traction à trois vitesses différentes (Fig.3.15 et Fig.3.16), ainsi qu'un essai de fatigue LCF, à la fois pour le Ti5553 MBD et le Ti17 Snecma. Les courbes de fatigue LCF montrent pour les deux alliages (Fig.3.13 et Fig.3.14) une dissymétrie lors des premiers cycles, qui va s'atténuer pour conduire à une boucle d'hystérésis stabilisée relativement symétrique. Par ailleurs, la partie en traction de la première boucle de fatigue est très semblable à la courbe de traction obtenue pour une vitesse de sollicitation équivalente. On observe une haute limite d'élasticité et un écrouissage très faible pour les deux alliages, alors que le comportement après quelques cycles de fatigue peut se décrire par une limite d'élasticité plus faible et un écrouissage relativement fort. Ce phénomène peut être lié au fait que les éprouvettes sont toutes prélevées dans le sens longitudinal des billettes, et qu'il subsiste probablement des traces de la pré-déformation. De fait, lorsque ces éprouvettes sont sollicitées, leur comportement est influencé par la pré-déformation due à la mise en forme du matériau. Cet effet tend à disparaître en fatigue LCF, lorsque le matériau subit des cycles de traction - compression.

En raison de la complexité des lois de comportement qui seraient nécessaires pour simuler une telle transition entre deux types de comportement très différents, et pour limiter le nombre de variables dans le modèle (cf. encadrés p.79), on fait le choix de distinguer les deux états :

• un jeu de paramètres matériau sera attribué pour le comportement billette du Ti5553 MBD et du Ti17 Snecma. La loi de comportement sera basée sur de l'écrouissage cinématique linéaire, ce qui permettra de décrire le comportement en traction.

• le comportement en fatigue sera décrit par une loi de comportement comprenant des variables d'écrouissage cinématique (3.36) et isotrope (3.37). On s'intéressera tout particulièrement aux cycles stabilisés, tels que définis pour les deux alliages dans les Fig.3.13 et Fig.3.14, puisqu'ils sont un des éléments représentatifs les plus importants en fatigue avec le nombre de cycles à rupture.

$$x^s = c\alpha^s \quad \text{avec } \dot{\alpha}^s = (\eta^s - d\alpha^s)\dot{v}^s \tag{3.36}$$

$$r^s = \tau_c^s + bQ\sum_r h_{sr}\rho^r \quad \text{avec } \dot{\rho}^{\,r} = (1 - b\rho^r)\dot{v}^r \tag{3.37}$$

Pour cette loi de comportement, on donne dans les tableaux présentés en page 79 le nombre de variables des modèles. Ces variables sont classées suivant l'échelle dans laquelle elles s'expriment. A l'échelle microscopique, on s'aperçoit que l'on peut atteindre très rapidement un nombre très important de scalaires à traiter : par exemple, pour la seule variable v^s, il faut compter, pour 100 ex-grains β, 100 x 7 x 72 soit 50 400 scalaires, si l'on considère en moyenne 6 variants α par ex-grain β.

On constate également que le modèle des champs translatés exige un nombre de scalaires supérieur à celui du modèle de la règle en β. Pour un agrégat de 100 ex-grains β, on comptera pour le modèle de la règle en β environ 215 000 scalaires dont 160 000 à intégrer, tandis que pour le modèle des champs translatés, il faudra plus de 300 000 scalaires dont 155 000 à intégrer.

On retient également que le temps de calcul sur un point de Gauss avec le modèle des champs translatés est environ 4 fois supérieur à celui nécessaire pour le modèle de la règle en β. Cet écart est principalement dû aux nombreuses opérations impliquant des tenseurs du quatrième ordre qui sont nécessaires dans le modèle des champs translatés.

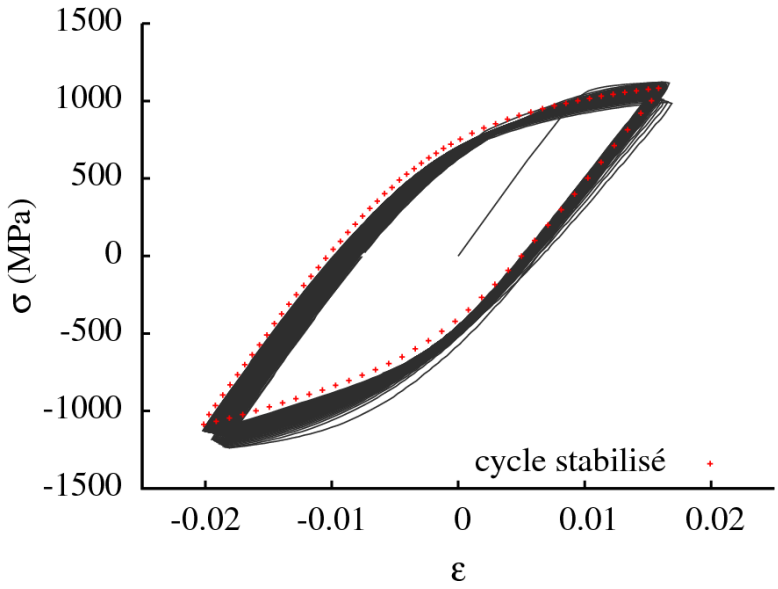


FIGURE 3.13 – Courbe contrainte – déformation dans le cas d'un essai de fatigue uniaxial sur du Ti17 Snecma.

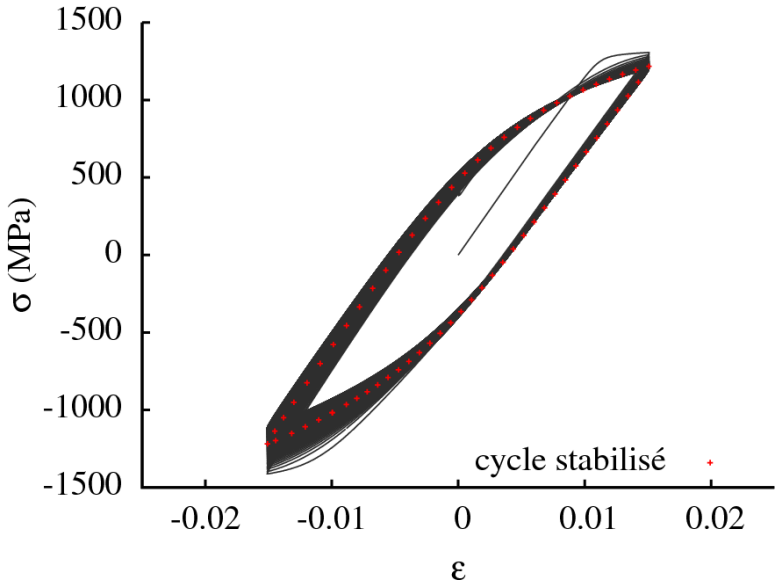


FIGURE 3.14 – Courbe contrainte – déformation dans le cas d'un essai de fatigue uniaxial sur du Ti5553 MBD.

Variables du modèle de la règle en β

Echelle	Type	Nomenclature	Taille (scalaires)
Macroscopique	Contrainte et déformation	$\underset{\sim}{\Sigma}$, $\underset{\sim}{E}$	6
	Règle en β	$\underset{\sim}{\mathcal{B}}$	6
	Module d'élasticité	E, ν, μ	1
Ex-grain β	Contrainte et déformation	$\underset{\sim}{\sigma}^g$, $\underset{\sim}{\varepsilon}^{vpg}$	6 x Ngrain
	Règle en β	$\underset{\sim}{\beta}^g$	6 x Ngrain
Inclusions i=0..Nvar	Contrainte et déformation	$\underset{\sim}{\sigma}_i^g$, $\underset{\sim}{\varepsilon}_i^{vpg}$	6 x Ngrain x (Nvar+1)
	Règle en β	$\underset{\sim}{\beta}_i^g$	6 x Ngrain x (Nvar+1)
Systèmes de glissement	Contrainte et déformation	τ^s, v^s	Ngrain x (Nvar+1) x Nsyst
	Ecrouissage	α^s, ρ^s	Ngrain x (Nvar+1) x Nsyst
	Tenseur de Schmid	$\underset{\sim}{m}_\alpha^s$, $\underset{\sim}{m}_\beta^s$	9 x Nsyst

ℹ Nvar se compose de 5 à 7 variants, Nsyst = 72 (24 systèmes α + 48 systèmes β)

Variables du modèle des champs translatés

Echelle	Type	Nomenclature	Taille (scalaires)
Macroscopique	Contrainte et déformation	$\underset{\sim}{\Sigma}$, $\underset{\sim}{E}$	6
	Tenseur effectif	$\underset{\sim}{C}$, $\underset{\sim}{B}$	36
	Tenseur de Green modifié	$\underset{\sim}{\Gamma}_{1\alpha}^C$, $\underset{\sim}{\Gamma}_{1\beta}^C$, $\underset{\sim}{\Gamma}_1^B$	36
Ex-grain β	Contrainte et déformation	$\underset{\sim}{\sigma}^g$, $\underset{\sim}{\varepsilon}^{vpg}$	6 x Ngrain
	Opérateur sécant	$\underset{\sim}{B}^g$	36 x Ngrain
	Tenseur de localisation	$\underset{\sim}{A}^{Cg}$, $\underset{\sim}{A}^{Bg}$	36 x Ngrain
Inclusions i=0..Nvar	Contrainte et déformation	$\underset{\sim}{\sigma}_i^g$, $\underset{\sim}{\varepsilon}_i^{eg}$, $\underset{\sim}{\varepsilon}_i^{vpg}$	6 x Ngrain x (Nvar+1)
	Tenseur d'élasticité	$\underset{\sim}{C}_\alpha$, $\underset{\sim}{C}_\beta$	36
	Opérateur sécant	$\underset{\sim}{B}_i^g$	36 x Ngrain x (Nvar+1)
	Tenseur de localisation	$\underset{\sim}{A}_i^{Cg}$, $\underset{\sim}{A}_i^{Bg}$	36 x Ngrain x (Nvar+1)
Systèmes de glissement	Contrainte et déformation	τ^s, v^s	Ngrain x (Nvar+1) x Nsyst
	Ecrouissage	α^s, ρ^s	Ngrain x (Nvar+1) x Nsyst
	Tenseur de Schmid	$\underset{\sim}{m}_\alpha^s$, $\underset{\sim}{m}_\beta^s$	9 x Nsyst

ℹ Nvar se compose de 5 à 7 variants, Nsyst = 72 (24 systèmes α + 48 systèmes β)

En ce qui concerne le comportement en traction, les paramètres matériau pour le Ti5553 Snecma et le Ti17 MBD sont respectivement présentés dans la table 3.6. La comparaison des courbes simulées avec notre modèle des champs translatés avec celles obtenues expérimentalement est montrée à la suite (Fig.3.15 et Fig.3.16).

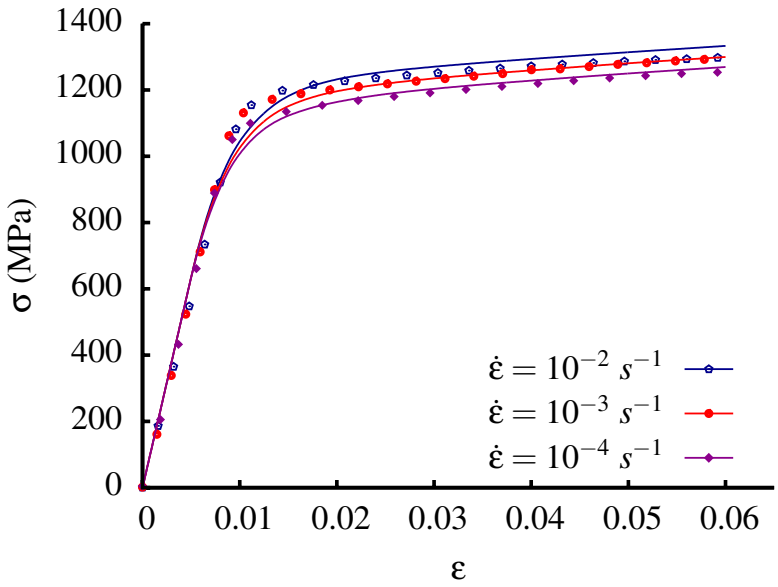


FIGURE 3.15 – Modèle des champs translatés : Courbes de traction uniaxiale à trois vitesses différentes pour le Ti17 Snecma. Les points représentent les résultats expérimentaux, et les traits représentent les simulations numériques.

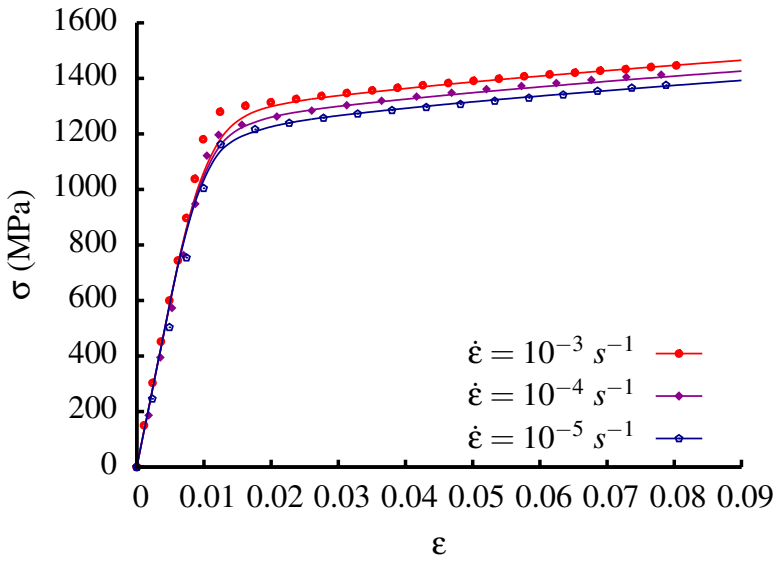


FIGURE 3.16 – Modèle des champs translatés : Courbes de traction uniaxiale à trois vitesses différentes pour le Ti5553 MBD. Les points représentent les résultats expérimentaux, et les traits représentent les simulations numériques.

On peut constater la bonne précision dans la prédiction des courbes de traction uniaxiale pour les différentes vitesses de sollicitation étudiées. On peut voir que la partie la plus critique à représenter est le coude de plasticité, parce que la transition entre le comportement élastique et le comportement plastique peu écroui est très rapide pour ces alliages, ce qui est difficile à représenter avec un modèle en plasticité cristalline puisque tous les systèmes de glissement ne s'activent pas en même temps. Des prédictions très similaires peuvent être obtenues avec le modèle de la règle en β, en prenant $\mathcal{D} = 100$ pour les deux phases (Fig.3.17 et Fig.3.18).

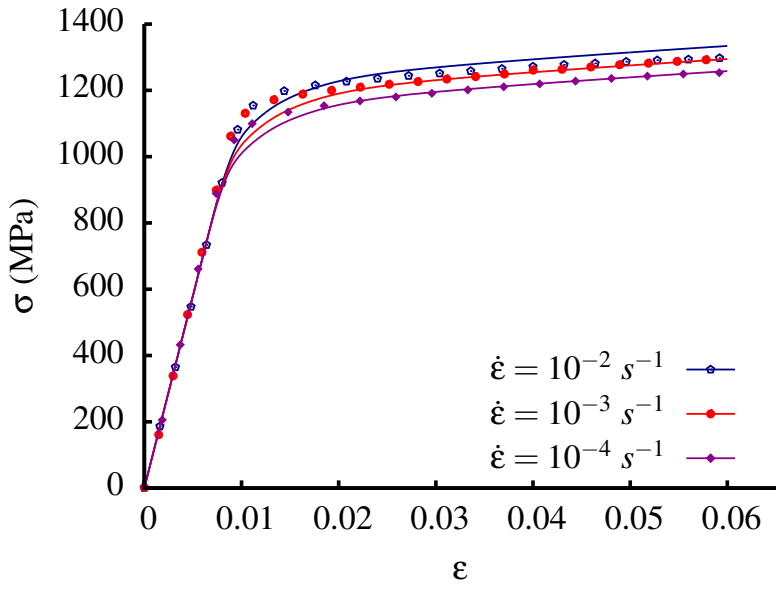


FIGURE 3.17 – Modèle de la règle en β : Courbes de traction uniaxiale à trois vitesses différentes pour le Ti17 Snecma. Les points représentent les résultats expérimentaux, et les traits représentent les simulations numériques.

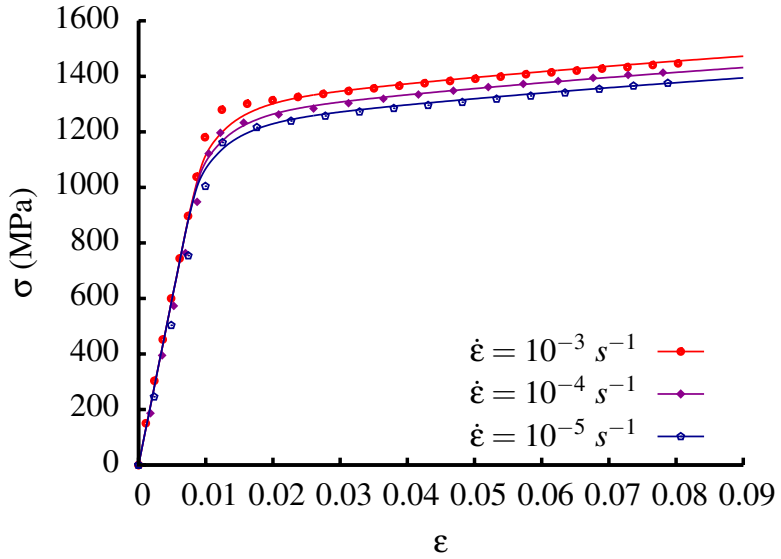


FIGURE 3.18 – Modèle de la règle en β : Courbes de traction uniaxiale à trois vitesses différentes pour le Ti5553 MBD. Les points représentent les résultats expérimentaux, et les traits représentent les simulations numériques.

		Règle en β ($\mathcal{D} = 100$)				Champs translatés			
		n	K MPa.s$^{1/n}$	τ_c^s MPa	c MPa	n	K MPa.s$^{1/n}$	τ_c^s MPa	c MPa
Ti17	Basal	30	240	205	800	30	240	195	100
	Prismatique	30	240	270	800	30	240	320	100
	Pyr. $<a>$	30	240	330	800	30	240	385	400
	Pyr. $<c+a>$	30	240	450	5000	30	240	590	5000
	{110}	20	300	295	3000	20	300	255	3000
	{112}	20	300	295	3000	20	300	255	6000
	{123}	20	300	315	3000	20	300	265	6000
Ti5553	Basal	30	270	210	800	30	270	215	300
	Prismatique	30	270	305	800	30	270	350	300
	Pyr. $<a>$	30	270	375	800	30	270	435	400
	Pyr. $<c+a>$	30	270	485	5000	30	270	620	5000
	{110}	20	300	335	2000	20	300	300	2000
	{112}	20	300	335	3000	20	300	300	3000
	{123}	20	300	345	5000	20	300	310	5000

TABLE 3.6 – Jeux de paramètres matériau du Ti5553 MBD et du Ti17 Snecma en traction pour les deux modèles proposés.

Les deux modèles permettent donc de prédire de manière précise le comportement élasto-viscoplastique en traction des alliages de titane Ti17 Snecma et Ti5553 MBD. Néanmoins, on attachera plus d'importance au modèle des champs translatés et aux paramètres en plasticité cristalline associés, puisque ce modèle rend compte de l'hétérogénéité élastique, ce qui est primordial lorsque l'on s'intéresse non plus au polycristal isotrope, mais aux grains β transformé, comme ce sera le cas par la suite et dans le chapitre 4.

Dans l'identification, il a été supposé que la viscosité de la phase β ne dépendait pas de son confinement. Les paramètres n et K seront donc les mêmes que ceux du monocristal β (Tab.3.3), tandis que les CRSS et les paramètres d'écrouissage seront pris plus élevés afin de rendre compte de l'effet de confinement de la plasticité au sein de la matrice β. Par ailleurs, il est à noter que la contribution des familles de systèmes de glissement de la phase β va être minoritaire dans la déformation du Ti17 Snecma (Fig.3.19b) et du Ti5553 MBD (Fig.3.20b), ce qui peut s'expliquer notamment par le fait que la fraction volumique de phase β est plus faible que celle de la phase α.
Pour l'identification des paramètres matériau de la phase α, on a fait en sorte que les répartitions données par [Duval, 2012] (voir p.12) des familles de systèmes de glissement soient respectées (Fig.3.19a et Fig.3.20a). Pour cela, la valeur de τ_c^s pour les systèmes basaux est prise très faible afin d'introduire une forme de microplasticité vers 800 MPa pour le Ti17 et vers 900 MPa pour le Ti5553. On permet ainsi au glissement basal, qui est restreint à trois systèmes de glissement seulement dans l'inclusion, d'atteindre près de 60% de contribution à la déformation de la phase α. Ce choix peut se justifier par le fait que dans la littérature (Tab.1.4), les CRSS proposées pour la famille basale sont "apparentes", dans le sens où elles sont calculées à partir des bandes de glissement et de la contrainte macroscopique. De fait,

la microplasticité, si elle existe, n'est pas prise en compte.
Les CRSS qui ont été proposées dans nos modèles pour les familles prismatiques et pyramidales $< a >$ sont relativement proches de celles de la littérature (Tab.1.4), et la CRSS de la famille pyramidale $< c+a >$ atteint presque le double de la valeur attribuée au glissement prismatique, ce qui est également en accord avec la littérature [Lütjering et Williams, 2007]. Il est important de souligner enfin que le choix des paramètres matériau reste critiquable : d'une part parce que les CRSS et les répartitions de familles de systèmes de glissement de la littérature sur lesquels on s'appuie ont été mesurées uniquement pour les nodules α du Ti5553 MBD, et d'autre part parce qu'on a fait le choix de traiter de manière commune les différentes morphologies de précipités α qui peuvent cohabiter dans les alliages de titane β-métastable (cf. introduction 3.1.4).

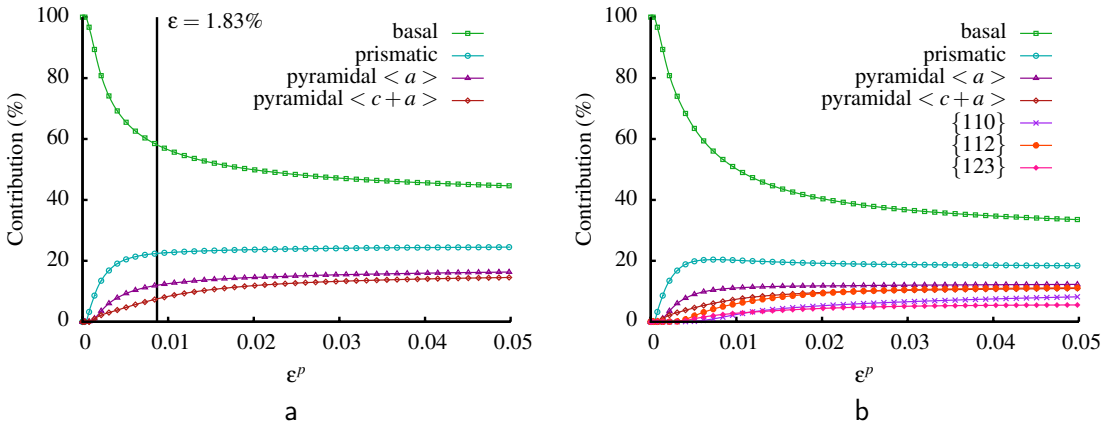


FIGURE 3.19 – Modèle des champs translatés, Ti17 Snecma : à gauche, contributions de chacune des familles de systèmes de glissement α à la déformation plastique de la phase α en fonction de la déformation plastique totale. A droite, contributions de toutes les familles de systèmes de glissement à la déformation plastique totale.

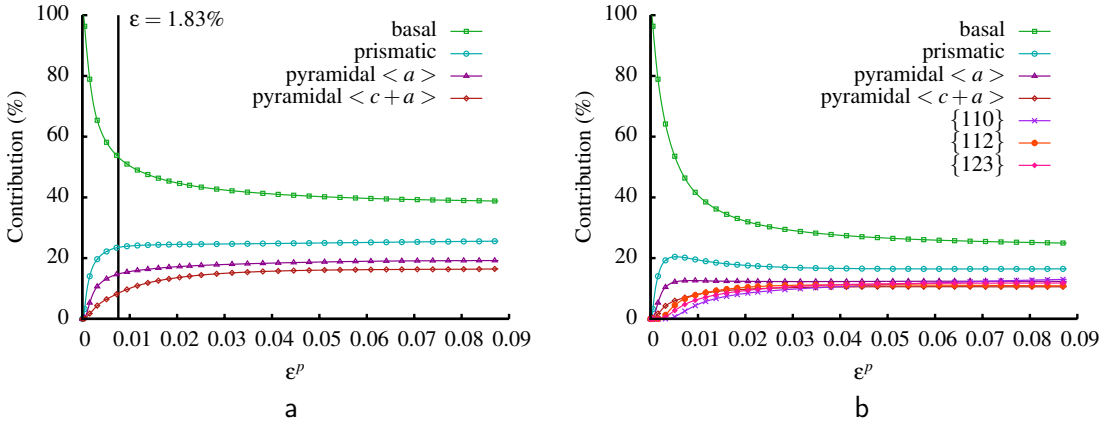


FIGURE 3.20 – Modèle des champs translatés, Ti5553 MBD : à gauche, contributions de chacune des familles de systèmes de glissement α à la déformation plastique de la phase α en fonction de la déformation plastique totale. A droite, contributions de toutes les familles de systèmes de glissement à la déformation plastique totale.

Il peut enfin être intéressant de regarder les contributions de chaque phase dans la déformation (Fig.3.21 et Fig.3.22). Selon nos modèles, la phase α se déforme plus que la

phase β : 2.42 fois plus pour le Ti17 Snecma (70%$_{vol}$ de phase α) et 1.6 fois plus pour le Ti5553 MBD (60%$_{vol}$ de phase α). Il est pour l'instant impossible de confronter ces résultats à des valeurs experimentales puisque la déformation reste difficilement quantifiable localement, notamment au sein de la matrice β transformée.

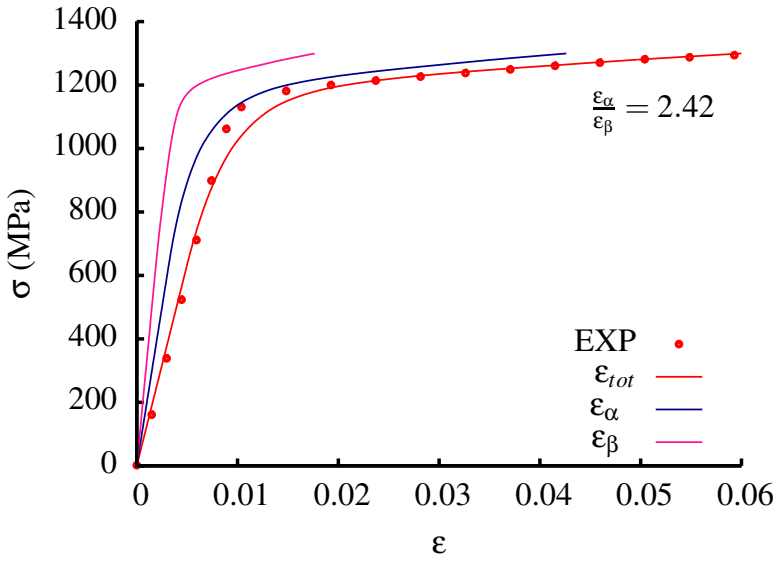


FIGURE 3.21 – Courbe de traction simulée et expérimentale pour le matériau Ti17 Snecma, et contributions de chacune des phases dans la simulation ($\varepsilon = \varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta$).

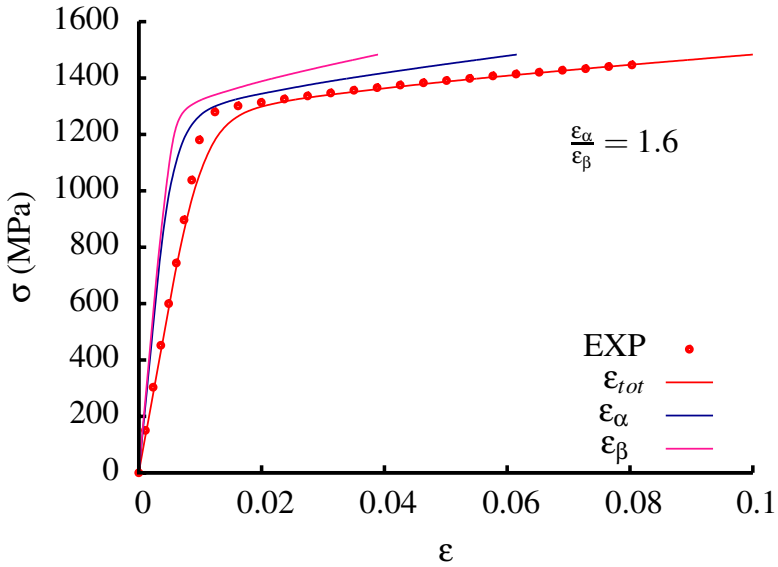


FIGURE 3.22 – Courbe de traction simulée et expérimentale pour le matériau Ti5553 MBD, et contributions de chacune des phases dans la simulation ($\varepsilon = \varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta$).

Pour compléter cette étude sur les microstructures industrielles, il est important de discuter de la robustesse des modèles étudiés, et notamment de celui basé sur les champs translatés. Lors de l'adaptation du modèle de Sabar et al., plusieurs simplifications ont été admises : pour rappel, une configuration géométrique particulière pour chaque variant α a notamment été considérée dans la partie élastique du modèle. Cette forme d'ellipsoïde aplati

étant ensuite négligée au profit de l'aspect sphérique dans la partie viscoplastique du modèle. Pour s'assurer de la cohérence de ce choix, une comparaison de notre modèle avec le modèle original est proposée. Dans cet esprit, l'essai simulé en traction uniaxiale à $10^{-3}s^{-1}$ pour un agrégat composé de 50 ex-grains β en Ti17 Snecma est repris, et comparé avec le modèle original de Sabar et al. dans deux situations particulières :

- une unique morphologie sphérique est attribuée à toutes les inclusions (variants α, matrice β) ;
- une unique morphologie d'ellipsoïde aplati ($a_1 = 1$, $a_2 = 0.036$ et $a_3 = 1.8$) est assignée pour chaque inclusion.

Les résultats, qui sont présentés dans la figure 3.23, montrent que les trois solutions donnent des réponses en déformation assez proches. Néanmoins, le résultat donné par notre modèle hybride se situe globalement entre les deux autres : les hypothèses qui ont été faites permettent donc d'obtenir un bon compromis entre respect des morphologies et respect de l'auto-cohérence.

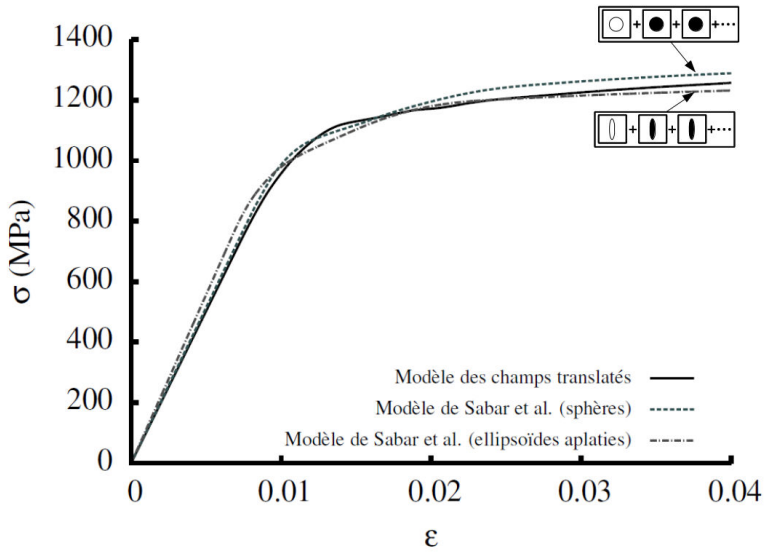


FIGURE 3.23 – Simulations en champs moyens pour le modèle de Sabar et al. dans le cas de l'inclusion sphérique et celui de l'inclusion ellipsoïdale aplatie, et pour le modèle des champs translatés basés sur les deux morphologies, tel que proposé dans le cadre des alliages de titane β-métastable.

Il est cependant important de quantifier l'erreur qui sera produite par notre modèle des champs translatés sur l'auto-cohérence. Pour cela, plusieurs indicateurs sont proposés : le premier a déjà été employé pour le modèle de Hill lorsque l'on a cherché à évaluer les constantes d'élasticité de l'alliage de titane biphasé (3.33). Cet indice d'erreur sera appliqué aux tenseurs de localisation $\underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{C}$ (e_{A_C}) et $\underset{\sim}{A}_{\mathrm{I}}^{B}$ (e_{A_B}). La seconde méthode pour estimer l'erreur à l'auto-cohérence consiste à suivre l'écart entre la contrainte moyennée et la contrainte déduite de la connaissance de $\underset{\sim}{\dot{E}}^{vp}$ (2.204) et de $\underset{\sim}{C}$ (3.21) :

$$e_\Sigma = \sqrt{\sum \left(\frac{\left\langle \underset{\sim}{C}_I : \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^e_I \right\rangle_{ij} - C_{ijkl}\left(\dot{E}_{ij} - \dot{E}^{vp}_{ij}\right)}{\left\langle \underset{\sim}{C}_I : \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^e_I \right\rangle_{ij}} \right)^2} \quad \text{(somme sur kl)} \tag{3.38}$$

Les indices d'erreur ont pu être établis lors du calcul précédent et sont présentés dans la figure 3.24. On remarque que conformément à ce que l'on pouvait attendre, l'indice e_{A_C} est du même ordre que celui calculé dans le cas purement élastique (Fig.3.11). L'indice e_{A_B} est quant à lui plus faible et proche de 1%, ce qui est cohérent puisque seule la morphologie sphérique est considérée pour la viscoplasticité. L'indice e_Σ, qui est plus global, nous donne une erreur que l'on juge acceptable de 6% environ.

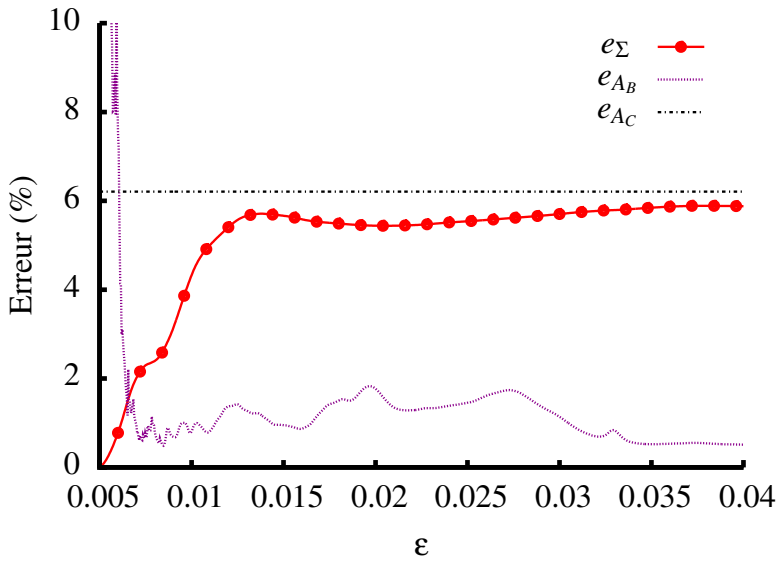


FIGURE 3.24 – Evaluation de l'intégrité de notre modèle des champs translatés pour un agrégat de 50 ex-grains β en Ti17 Snecma.

Si le modèle des champs translatés peut être validé à partir des vérifications effectuées précédemment, il est également important de définir quel est son domaine de validité. On s'est jusqu'à présent intéressé aux agrégats de grains β transformé, pour lesquels la réponse globale est plus ou moins isotrope, du fait de l'effet de moyenne sur la grande diversité de comportements locaux. Lorsque l'on s'intéresse à des agrégats de plus petite taille, voire à des ex-grains β en particulier, on peut pressentir que le modèle sera beaucoup moins précis car les variables effectives seront beaucoup plus anisotropes. C'est ce que l'on a cherché à quantifier avec la figure 3.25. Pour des agrégats assez petits (10 ex-grains β), le résultat reste acceptable (6-7% d'erreur), mais on constate que le modèle n'est plus cohérent (25% d'erreur) lorsque l'on cherche à simuler le comportement d'un seul ex-grain β. On sera donc contraint dans ce cas là de revenir au modèle plus classique de Sabar et al., en prenant une morphologie sphérique pour toutes les inclusions afin de retrouver un e_Σ plus faible, et en supposant que les paramètres matériau restent valables dans cette nouvelle configuration, ce qui semble être le cas au regard des courbes présentées sur la figure 3.26.

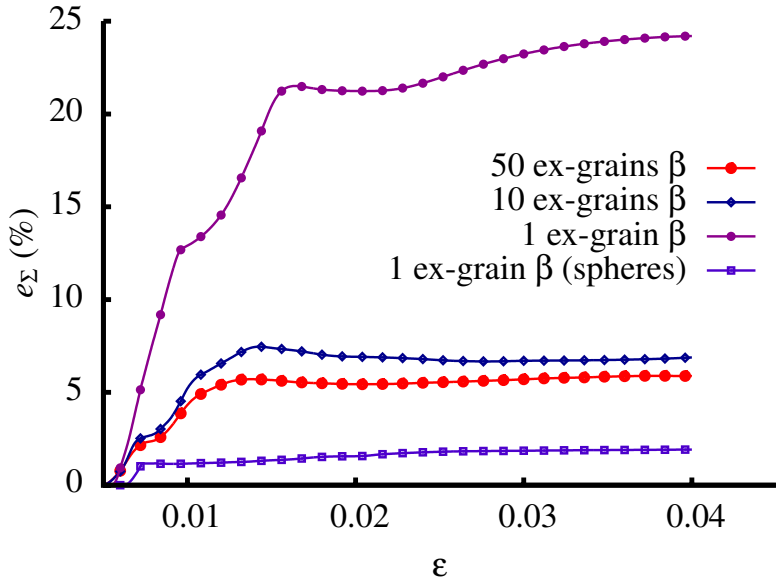


FIGURE 3.25 – Evaluation de l'indice e_Σ dans le modèle des champs translatés pour de différentes tailles d'agrégats en Ti17 Snecma.

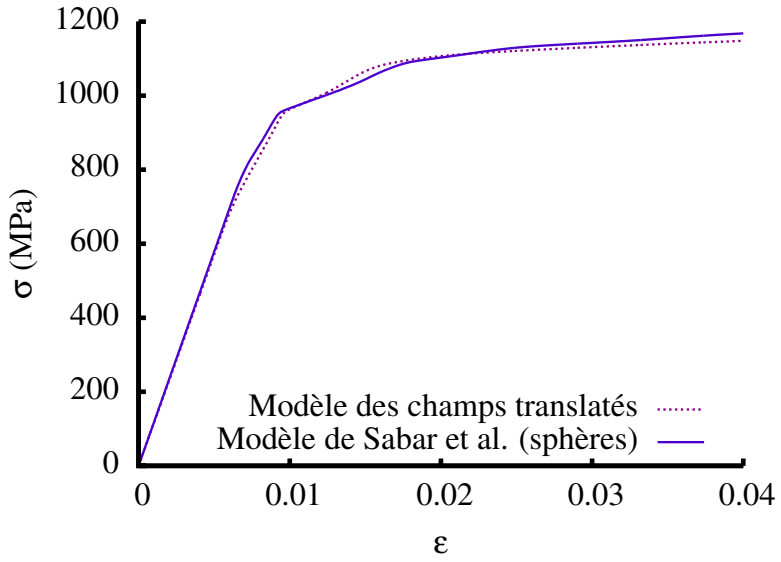


FIGURE 3.26 – Courbes contrainte – déformation simulées pour un ex-grain β avec le modèle des champs translatés (sphères + ellipsoïdes aplatis), et avec le modèle classique de Sabar et al. (sphères).

En tenant compte de cette modification inhérente à l'homogénéisation des constituants d'un unique grain β transformé, on peut s'intéresser, dans la continuité de l'étude sur les monocristaux β (Fig.3.8), aux grains β transformé ayant des orientations cristallographiques particulières, dans le but d'encadrer les variations des comportements locaux. Mais contrairement au cas monophasé β, on est amené à considérer plusieurs solutions puisqu'il existe un grand nombre d'arrangements pour les variants α. En conséquence, on propose de faire dans un premier temps un calcul en considérant les 12 variants α, puis, dans un second temps, simuler le comportement du grain β transformé avec un seul d'entre eux (Fig.3.28 pour le Ti5553 et Fig.3.29 pour le Ti17). Au vu des résultats, on constate que la hiérar-

chie dégagée pour le 100% β est conservée. Les propriétés mécaniques les plus faibles en traction uniaxiale sont obtenues lorsque la phase β du grain β transformé est orientée selon la direction $< 100 >_\beta$, et ce quels que soient les variants présents. La direction $< 111 >_\beta$ est majoritairement la plus résistante, tandis que la direction $< 110 >_\beta$ reste intermédiaire. Pour plus de visibilité dans les figures suivantes, on regroupe par paire les variants ayant le même plan basal, ce qui est logique puisqu'ils donnent un résultat identique. De plus, on retrouve des configurations équivalentes pour les trois directions β testées :

- Lorsque la matrice β a une direction $< 100 >_\beta$ parallèle à l'axe de sollicitation, on retrouve deux configurations pour les variants α. Soit la direction de traction est parallèle au plan basal du variant considéré (variants 1,2,3,4), soit elle forme un angle de 45° avec ce dernier (tous les autres).

- Pour la direction $< 110 >_\beta$ parallèle à l'axe de sollicitation, il y a trois possibilités. Les variants α peuvent avoir leur plan basal parallèle à l'axe de traction (variants 11,12), ou bien perpendiculaire (variants 9,10), ce qui conduit à la plus grande résistance de la structure hexagonale. La dernière configuration, valable pour les autres variants, se trouve lorsque le plan basal est de biais par rapport à l'axe de traction.

- Enfin, lorsque la phase β partage une direction $< 111 >_\beta$ avec l'axe de traction, on observe deux possibilités, la première où l'axe de traction se trouve dans le plan basal (3,4,7,8,11,12), et la seconde où il est de biais par rapport à ce dernier (1,2,5,6,9,10).

On propose également de vérifier ce qui peut sembler évident au premier abord : un grain β transformé composé d'une matrice β non-orientée et des 12 variants α équiprobables conserve la symétrie cubique de la phase β (Fig.3.27).

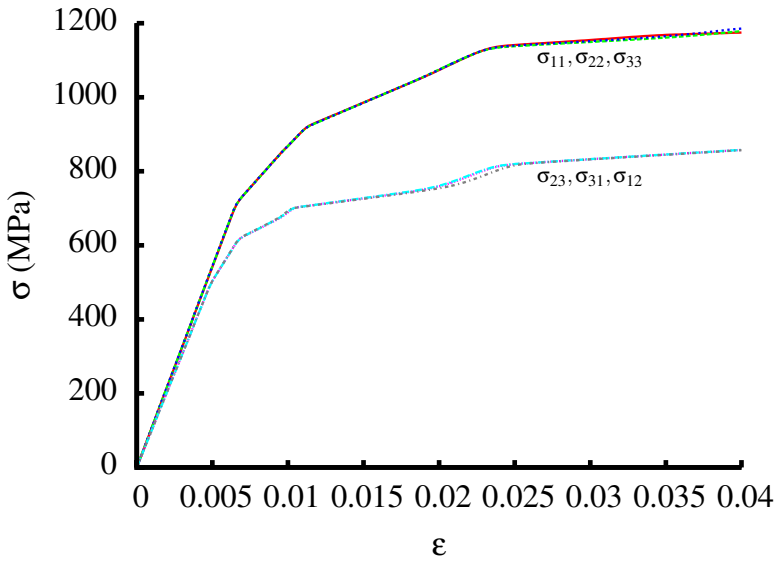


FIGURE 3.27 – Courbes obtenues lors des six essais à déformation imposée selon ε_{11}, ε_{22}, ε_{33}, ε_{12}, ε_{23} et ε_{31} pour un grain β transformé en Ti17 Snecma orienté $< 100 >_\beta$ avec ses 12 variants α équiprobables. Les composantes non imposées sont à contraintes nulles.

On remarque que la présence des 12 variants α dans la matrice β renforce sa résistance au cisaillement. En effet le rapport σ/τ, qui vaut 2 pour Tresca et 1.7 pour von Mises, est ici de 1.37 seulement.

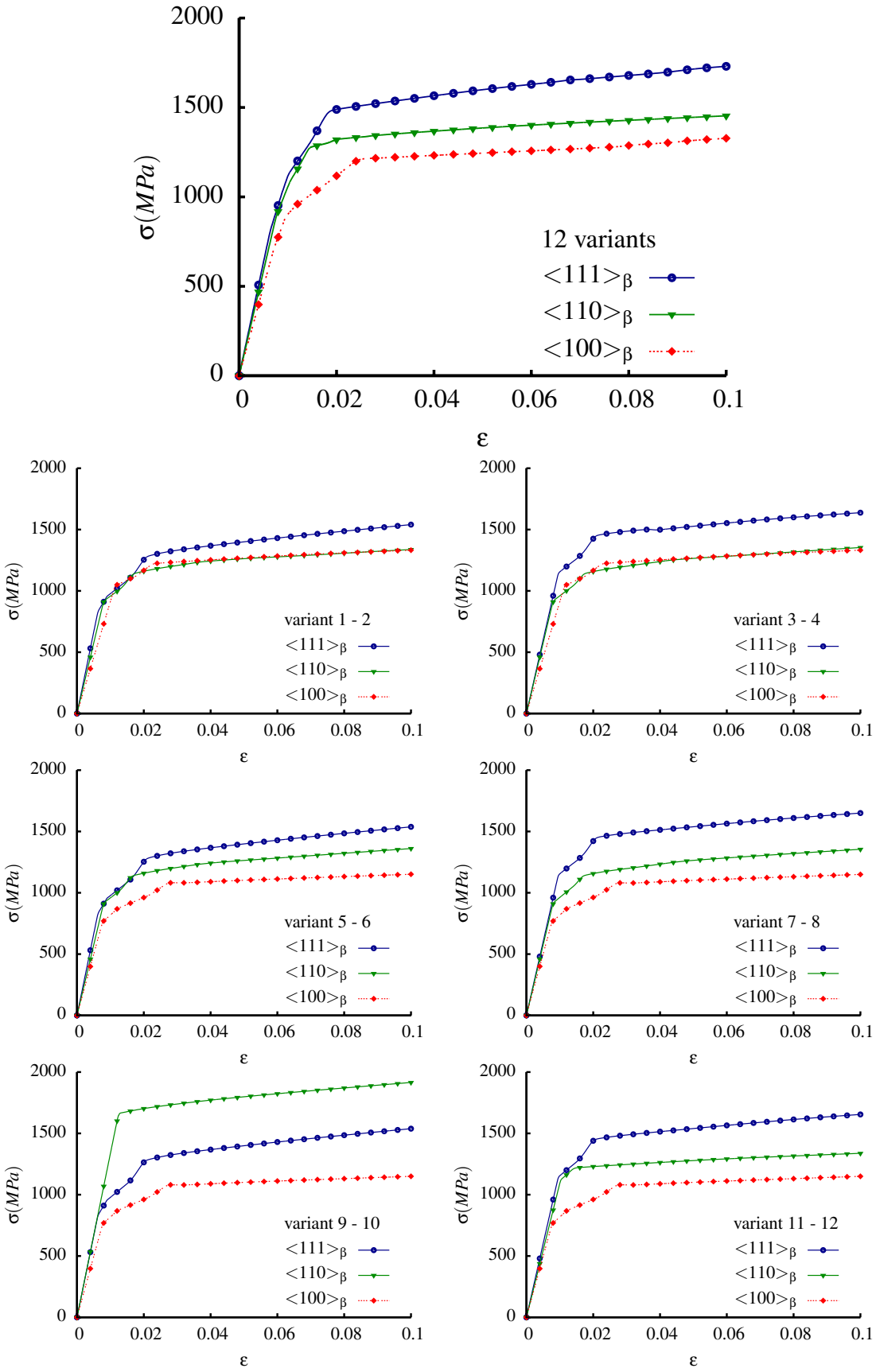


FIGURE 3.28 – Courbes de traction uniaxiale simulées pour un ex-grain β en Ti5553 MBD, dont la matrice est orientée $< 100 >_\beta$, $< 110 >_\beta$ ou $< 111 >_\beta$, et en prenant en compte les 12 variants α ou seulement l'un d'entre eux.

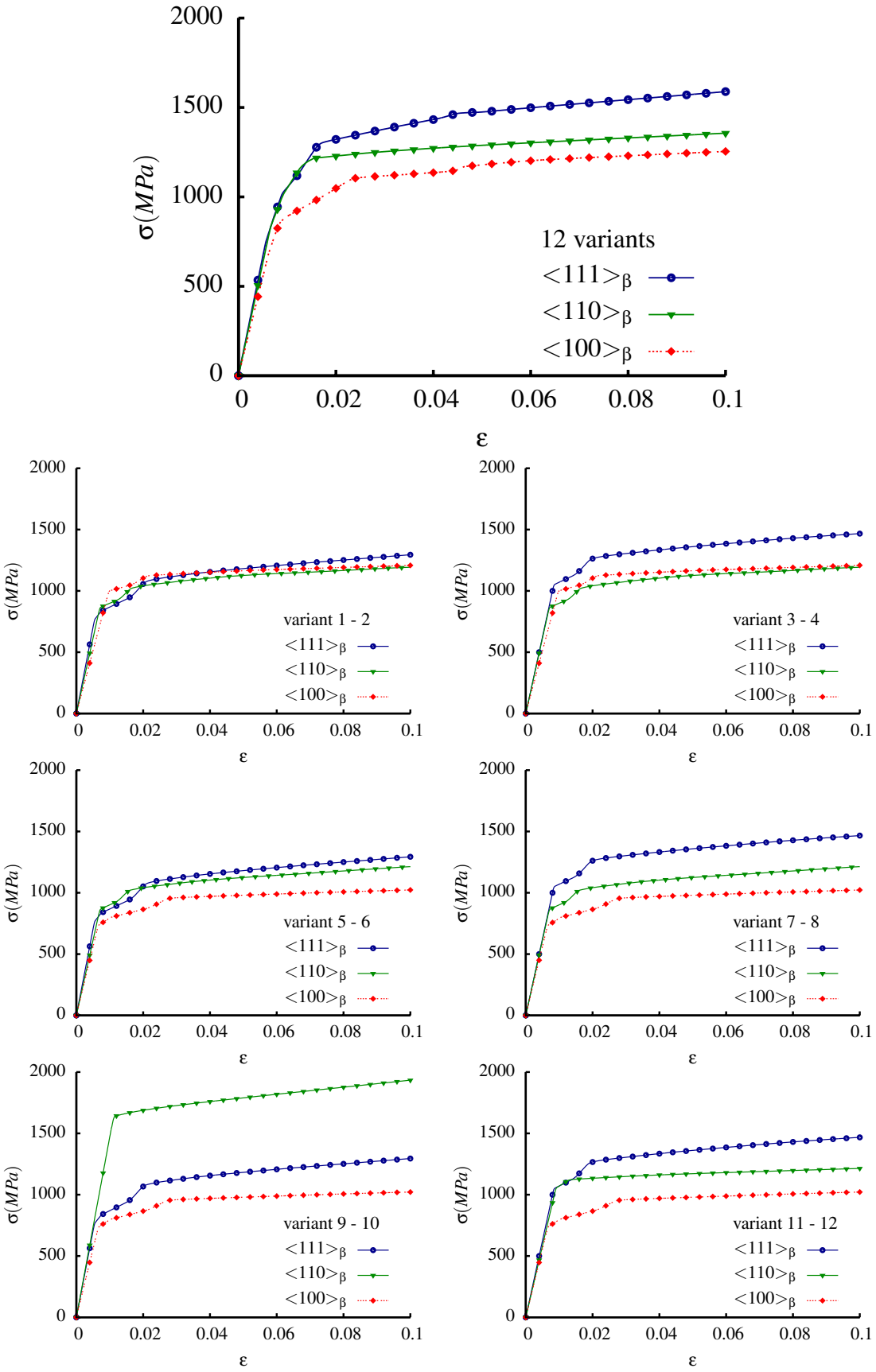


FIGURE 3.29 – Courbes de traction uniaxiale simulées pour un ex-grain β en Ti17 Snecma, dont la matrice est orientée $< 100 >_\beta$, $< 110 >_\beta$ ou $< 111 >_\beta$, et en prenant en compte les 12 variants α ou seulement l'un d'entre eux.

La dernière partie de cette section est consacrée au comportement en fatigue. Comme cela a été mentionné précédemment, les microstructures industrielles présentent en fatigue un comportement différent de celui en traction du fait de la pré-déformation liée à la mise en forme. Une loi de comportement différente est donc prise dans les deux modèles d'homogénéisation qui ont été développés. Les résultats après identification sont montrés dans les figures 3.30 et 3.31 pour le modèle des champs translatés, et dans les figures 3.32 et 3.33 pour le modèle de la règle en β. On s'appuie pour l'identification sur le deuxième cycle de fatigue, le premier n'ayant pas un comportement représentatif, et sur le cycle stabilisé. Les paramètres matériau sont donnés dans le tableau 3.7, et les paramètres de viscosité restent les mêmes que ceux proposés dans le tableau 3.6.

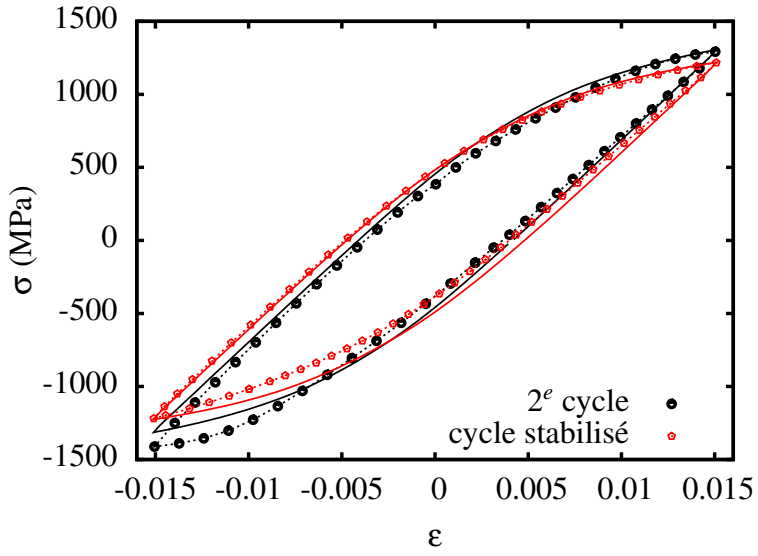


FIGURE 3.30 – Cycle de fatigue LCF au début de l'essai et lors de sa stabilisation pour le Ti5553 MBD avec le modèle des champs translatés. Les traits définissent la simulation, tandis que les points représentent les résultats expérimentaux.

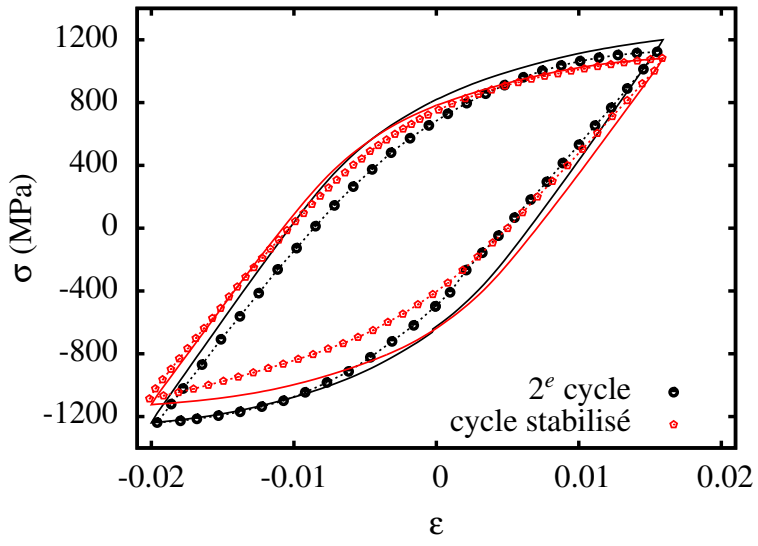


FIGURE 3.31 – Cycle de fatigue LCF au début de l'essai et lors de sa stabilisation pour le Ti17 Snecma avec le modèle des champs translatés. Les traits définissent la simulation, tandis que les points représentent les résultats expérimentaux.

On remarque que pour le Ti17 Snecma, le module d'élasticité en compression est différent de celui en traction dans la mesure expérimentale, ce qui a rendu la représentation numérique plus difficile, étant donné que les modèles ne tiennent pas compte des dissymétries traction – compression.

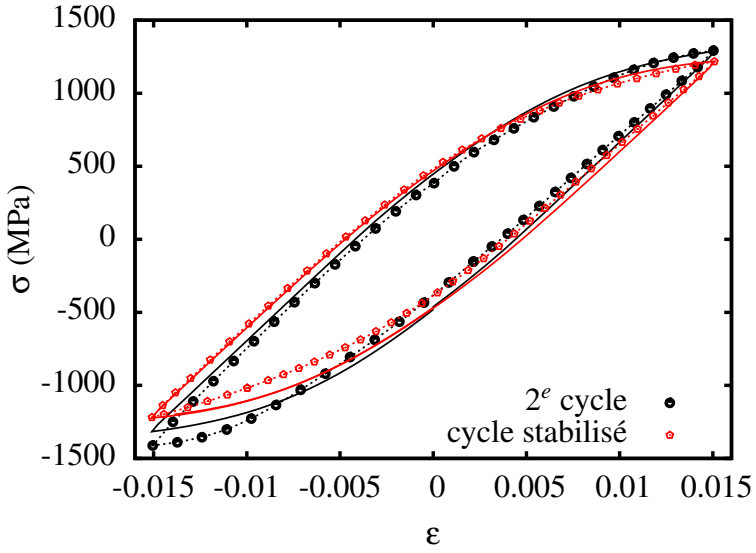


FIGURE 3.32 – Cycle de fatigue LCF au début de l'essai et lors de la stabilisation pour le Ti5553 MBD avec le modèle de la règle en β. Les traits définissent la simulation, tandis que les points représentent les résultats expérimentaux.

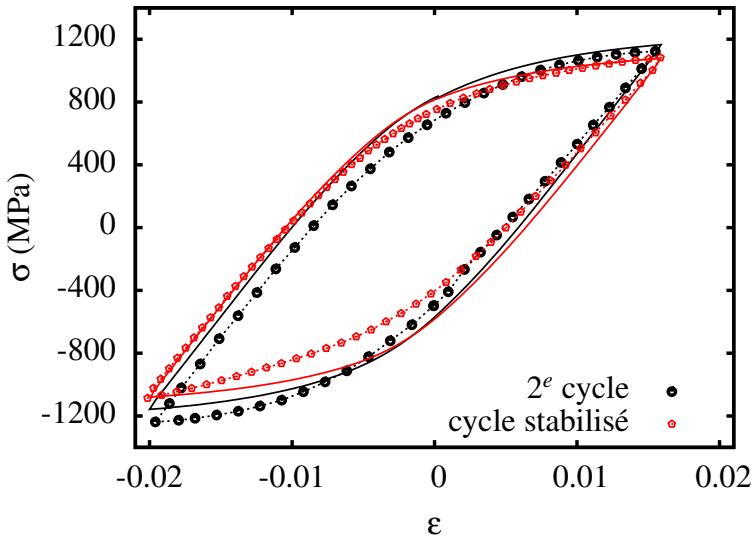


FIGURE 3.33 – Cycle de fatigue LCF au début de l'essai et lors de sa stabilisation pour le Ti17 Snecma avec le modèle de la règle en β. Les traits définissent la simulation, tandis que les points représentent les résultats expérimentaux.

En l'absence de connaissance sur les types d'interactions entre dislocations dans ces alliages, on a supposé que toutes les interactions dans une famille de systèmes de glissement sont équivalentes, ce qui revient à travailler avec une matrice d'interaction composée de blocs unitaires.

		Règle en β ($\mathcal{D} = 50$)					Champs translatés				
		τ_c^s MPa	c MPa	d	Q MPa	b	τ_c^s MPa	c MPa	d	Q MPa	b
Ti17	Basal	50	3.10^5	1500	-20	30	40	3.10^5	1500	-20	30
	Prismatique	80	3.10^5	1500	-20	30	130	3.10^5	1500	-20	30
	Pyr. $<a>$	125	3.10^5	1500	-20	30	180	3.10^5	1500	-20	30
	Pyr. $<c+a>$	235	5.10^5	1500	-20	30	375	5.10^5	1500	-20	30
	{110}	160	3.10^5	1500	-20	30	120	3.10^5	1500	-20	30
	{112}	160	3.10^5	1500	-20	30	120	3.10^5	1500	-20	30
	{123}	170	5.10^5	1500	-20	30	130	5.10^5	1500	-20	30
Ti5553	Basal	55	3.10^5	1200	-15	40	60	3.10^5	1200	-15	40
	Prismatique	105	3.10^5	1200	-15	40	150	3.10^5	1200	-15	40
	Pyr. $<a>$	140	3.10^5	1200	-15	40	200	3.10^5	1200	-15	40
	Pyr. $<c+a>$	260	4.10^5	1200	-15	40	395	4.10^5	1200	-15	40
	{110}	175	3.10^5	1200	-15	40	140	3.10^5	1200	-15	40
	{112}	175	3.10^5	1200	-15	40	140	3.10^5	1200	-15	40
	{123}	185	4.10^5	1200	-15	40	150	4.10^5	1200	-15	40

TABLE 3.7 – Jeux de paramètres matériau du Ti5553 MBD et du Ti17 Snecma en fatigue LCF.

3.2 Relations microstructure – propriétés mécaniques

3.2.1 Dépendance du seuil de plasticité et de l'écrouissage en fonction de la microstructure

Les alliages de titane sont connus pour avoir des propriétés mécaniques très dépendantes de la microstructure, notamment l'élasticité, l'écrouissage, le seuil de plasticité et la ductilité. Étant donné que l'endommagement n'est pas pris en compte dans cette étude, nous nous concentrerons uniquement sur les trois premières propriétés, qui peuvent, dans une approche minimaliste, être représentées par la courbe simplifiée de la figure 3.34.

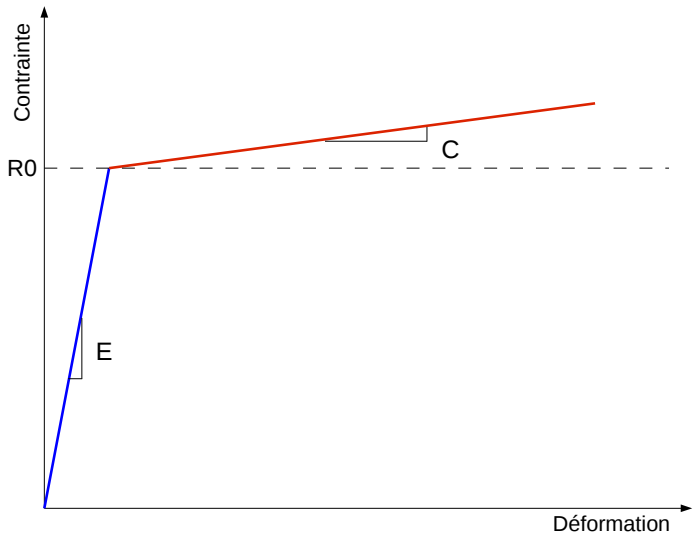


FIGURE 3.34 – Courbe simplifiée en contrainte – déformation.

où R_0 et C représentent respectivement le seuil de plasticité et la pente d'écrouissage à l'échelle macroscopique. L'enjeu consiste alors à relier ces propriétés mécaniques à des caractéristiques microstructurales.

Les données les plus facilement accessibles d'un point de vue expérimental sont les fractions volumiques (f_{α_1}, f_{α_2}) et les épaisseurs (d_{α_1}, d_{α_2}) des différentes populations de précipités α. Or, il s'avère qu'il est possible de représenter le confinement morphologique au sein des phases α et β au travers de ces grandeurs, comme l'illustre la figure 3.35.

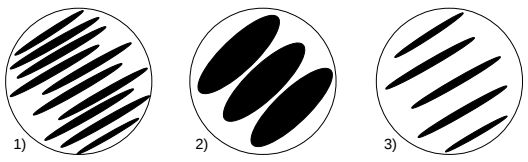


FIGURE 3.35 – Illustration de trois cas de microstructure élémentaire : $f_\alpha^1 = f_\alpha^2 \gg f_\alpha^3$ et $d_\alpha^1 = d_\alpha^3 \ll d_\alpha^2$.

On s'aperçoit avec cet exemple que la seule connaissance des f_α^i et des d_α^i est suffisante pour évaluer le confinement : il semble élevé au sein des deux phases pour le premier cas, seulement dans la matrice β pour le second cas, et uniquement dans les précipités α pour

le dernier cas.
On va supposer pour la suite que le confinement est l'unique facteur d'influence sur les propriétés mécaniques. On peut justifier cette hypothèse du fait qu'il a été montré expérimentalement que ce phénomène durcissant était très présent (Fig.1.30), et qu'il jouait même un rôle prédominant dans les relations microstructures – propriétés mécaniques (cf. section 1.4).

On propose donc des fonctions polynomiales construites à partir des variables f_{α_1}, f_{α_2}, d_{α_1} et d_{α_2} qui influenceront les caractéristiques mécaniques R_0 et C. La détermination de ces fonctions et des constantes associées est rendue possible par l'utilisation des 34 microstructures qui sont à notre disposition grâce au projet PROMITI, et qui sont décrites dans les annexes B.1 et B.2. Pour chaque microstructure, un essai de traction a été effectué, et les caractéristiques microstructurales ont été mesurées à l'aide des clichés MEB des microstructures modèles (Tab.1.7 et Tab.1.9).

Par traitement des données compilées pour les 34 microstructures avec le logiciel Matlab®, on obtient deux systèmes d'équations. On propose alors deux fonctions polynomiales (3.39) et (3.40), dont la résolution permet d'obtenir les constantes (A_i, B_i) présentées dans la table 3.8. Ces fonctions ne sont pas explicitement données pour des raisons de confidentialité. Il est également important de souligner que les composantes des deux fonctions n'ont pas de sens physique, la construction se faisant de manière purement empirique.

$$R_0 = \Pi^1(f_{\alpha_1}, d_{\alpha_1}, f_{\alpha_2}, d_{\alpha_2}) \tag{3.39}$$

$$C = \Pi^2(f_{\alpha_1}, d_{\alpha_1}, f_{\alpha_2}, d_{\alpha_2}) \tag{3.40}$$

R_0	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5	A_6	A_7	A_8
	Confidentiel							
C	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	B_6	B_7	
	Confidentiel							

TABLE 3.8 – Constantes des fonctions R_0 et C

La constante A_0 définit le seuil de plasticité apparent sur les courbes de traction de la microstructure 100% β, qu'on peut estimer égale à 800 MPa.

Pour illustrer les évolutions représentées par la fonction R_0, des courbes de tendance sont proposées pour une seule population de phase α, en faisant varier la fraction de phase α (Fig.3.36) et l'épaisseur apparente des précipités α (Fig.3.37).

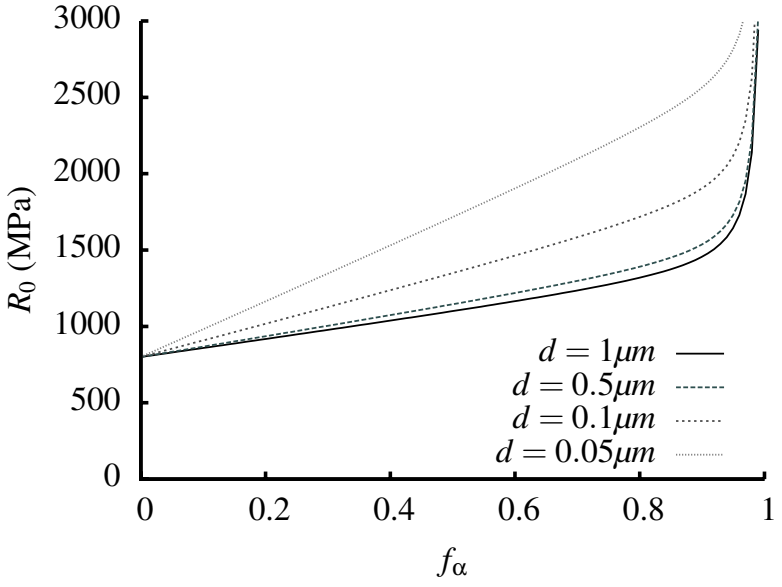


FIGURE 3.36 – Evolution du seuil de plasticité en fonction de la fraction volumique de phase α pour une population de phase α avec une épaisseur de précipités donnée.

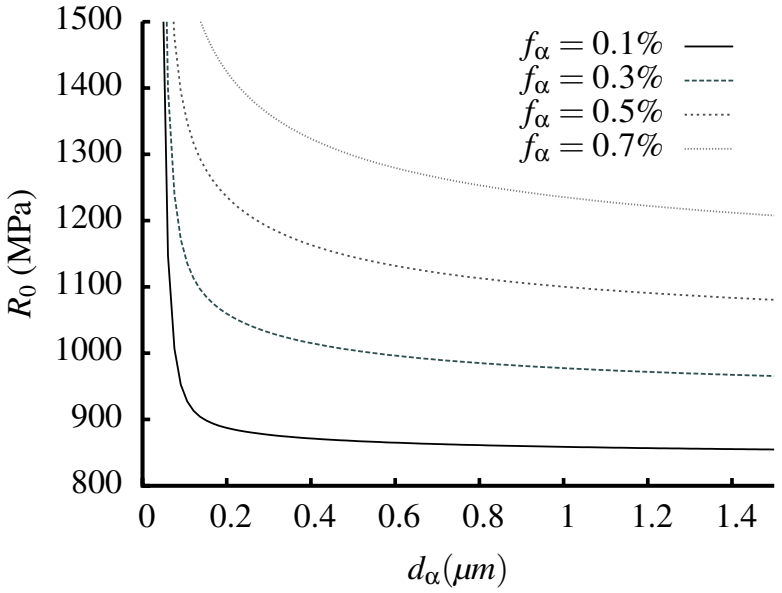


FIGURE 3.37 – Evolution du seuil de plasticité en fonction de l'épaisseur apparente d'une population de précipités α avec une fraction volumique de phase α donnée.

3.2.2 Application au modèle des champs translatés en plasticité de von Mises

Dans cette partie, les fonctions polynomiales vont être intégrées au modèle des champs translatés qui a été introduit dans la section précédente pour les alliages de titane β-métastable. Néanmoins, pour simplifier le problème, la plasticité cristalline ne sera pas utilisée, et c'est un critère de von Mises (2.2.2) qui sera associé à chaque inclusion. De fait, les propriétés élastiques locales sont toujours prises en compte, mais les hétérogénéités plastiques s'en trouvent négligées. Une description du modèle est donné dans l'algorithme

présenté p.99. On note que dans le contexte de la plasticité basée sur le critère de von Mises (2.54), l'opérateur viscoplastique local s'écrira :

$$\underset{\sim}{B}_{\mathrm{I}} = \left[\frac{\partial \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_{\mathrm{I}}}{\partial \underset{\sim}{\sigma}_{\mathrm{I}}}\right]^{-1} = \left[\frac{n}{K}\left\langle\frac{f}{K}\right\rangle^{n-1} : \underset{\sim}{n}\otimes\underset{\sim}{n} + \left\langle\frac{f}{K}\right\rangle^{n} : \underset{\sim}{N}\right]^{-1} \tag{3.41}$$

Des variables d'écrouissage simples sont utilisées dans le modèle afin d'introduire plus facilement les fonctions polynomiales (R_0 et C). Une légère différenciation sera faite entre les variables attribuées à chacune des deux phases, de manière à retrouver le comportement mécanique du polycristal 100% β lorsque la fraction volumique de phase α tendra vers zero.

- Phase α

$$\underset{\sim}{X} = \frac{2}{3}C\underset{\sim}{\varepsilon}^{vp}_{\mathrm{I}} \quad (D=0) \tag{3.42}$$

$$R = R_0 + R_\alpha \tag{3.43}$$

- Phase β

$$\underset{\sim}{X} = \frac{2}{3}\left(C_\beta + \frac{C}{2}\right)\underset{\sim}{\varepsilon}^{vp}_{\mathrm{I}} \quad (D=0) \tag{3.44}$$

$$R = R_0 + R_\beta \tag{3.45}$$

où R_β et C_β sont les constantes qui définissent le monocristal β (identification à partir de la courbe expérimentale B.2), et R_α une constante spécifiquement calibrée pour les alliages Ti5553 et Ti17. Les constantes R_α et R_β viennent remplacer le terme macroscopique A_0 introduit dans la partie précédente. On a également identifié les paramètres de la viscosité dans le modèle en ajustant les courbes présentées dans les figures 3.3, 3.15 et 3.16, comme cela avait été fait dans le cas de la plasticité cristalline. L'ensemble des paramètres matériau sont présentés dans le tableau 3.9. On s'assure de la bonne représentativité des fonctions polynomiales en simulant sur un point de Gauss l'ensemble des essais de traction uniaxiale pour les 34 microstructures (résultats présentés en annexe B.1 et B.2). Etant donné que les hétérogénéités plastiques ne sont pas prises en compte, prendre une dizaine d'ex-grains β pour les calculs est suffisant (Fig.3.38).

α	n	K (MPa.$s^{1/n}$)	R_α (MPa)	
Ti17	20	500	460	
Ti5553	15	800	465	
β	n	K (MPa.$s^{1/n}$)	R_β (MPa)	C_β (MPa)
	20	570	415	500

TABLE 3.9 – Jeu de paramètres pour le modèle des champs translatés avec des lois de comportement de type von Mises dépendantes de la microstructure.

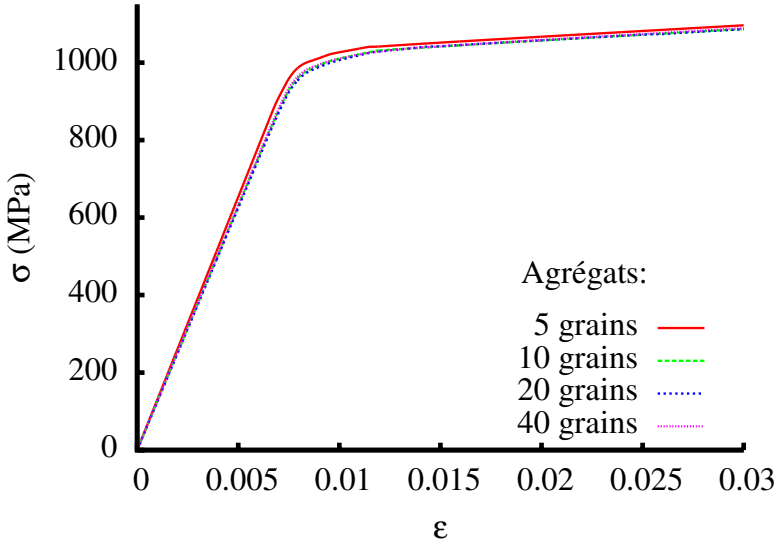


FIGURE 3.38 – Simulation d'une traction uniaxiale sur le matériau Ti17 Snecma avec plusieurs tailles d'agrégat.

Les résultats sont globalement assez proches de l'expérience si on tient compte du fait que l'on ne dispose que d'un essai par microstructure et que les caractéristiques microstructurales ont été mesurées localement sur des clichés de microstructures. L'information n'est donc pas forcement très représentative du matériau dans son ensemble. Une synthèse des résultats est présentée dans la figure 3.39 : il s'agit de la comparaison entre contrainte expérimentale et contrainte simulée à 3% de déformation totale pour toutes les microstructures dont l'allongement dépasse cette valeur. Il apparaît qu'une précision de $\pm$ 50 MPa est obtenue par rapport à la bissectrice de référence dans le processus d'identification. Quant aux microstructures présentant peu de ductilité du fait de la présence de populations α très denses et très fines (Fig.B.1.14, Fig.B.2.14, Fig.B.2.16), une plus grande marge d'erreur est constatée. Cet écart peut être attribué au fait que les fonctions polynomiales ont une limite à l'infini pour les tailles décroissantes de précipités (Fig.3.37).

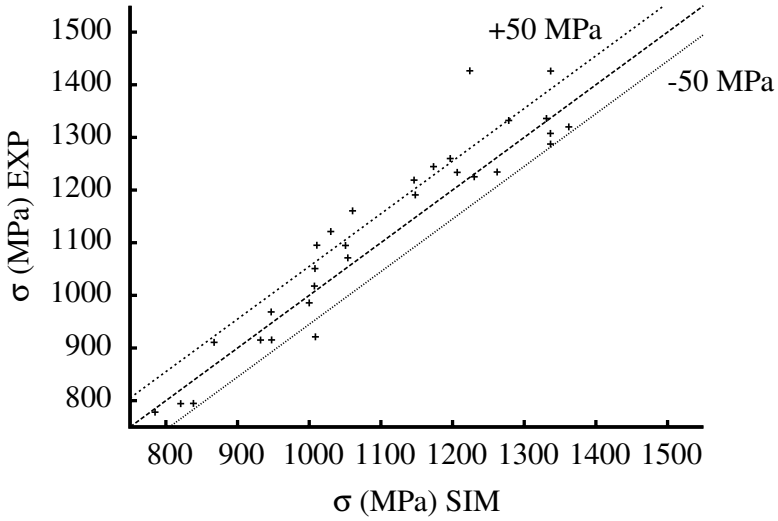


FIGURE 3.39 – Contraintes simulées et expérimentales à 3% de déformation totale issues des courbes de traction uniaxiale pour les différentes microstructures étudiées. Les comparaisons entre courbe expérimentale et courbe simulée sont présentées en annexe B.1 et B.2.

Algorithme : Champs translatés (von Mises)

Variant α $(i = 1..\text{Nvar})$

$$\underset{\sim}{\sigma}_i^g = \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_i^g : \underset{\sim}{\varepsilon}_i^{eg} \quad \text{avec } \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_i^g = \left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{R}}_{21} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_\alpha : \underset{\sim}{\underset{\sim}{R}}_{21}^T\right]$$

$$\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_i^{vpg} = \dot{p}\underset{\sim}{n} \quad \text{avec} \quad \dot{p} = \left\langle \frac{J\left(\underset{\sim}{\sigma}_i^g - \underset{\sim}{X}\right) - R}{K} \right\rangle^n \quad \text{et} \quad \underset{\sim}{n} = \frac{3}{2}\,\frac{\underset{\sim}{s}_i^g - \underset{\sim}{X}}{J\left(\underset{\sim}{\sigma}_i^g - \underset{\sim}{X}\right)}$$

$$\underset{\sim}{\underset{\sim}{B}}_i^{g^{-1}} = \frac{n}{K}\left\langle \frac{f}{K} \right\rangle^{n-1} : \underset{\sim}{n} \otimes \underset{\sim}{n} + \left\langle \frac{f}{K} \right\rangle^n : \underset{\sim}{\underset{\sim}{N}}$$

Matrice β $(i = 0)$

$$\underset{\sim}{\sigma}_0^g = \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_0^g : \underset{\sim}{\varepsilon}_0^{eg} \quad \text{avec } \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_0^g = \left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{R}}_1 : \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_\beta : \underset{\sim}{\underset{\sim}{R}}_1^T\right]$$

$$\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_0^{vpg} = \dot{p}\underset{\sim}{n} \text{ avec } \dot{p} = \left\langle \frac{J\left(\underset{\sim}{\sigma}_0^g - \underset{\sim}{X}\right) - R}{K} \right\rangle^n \text{ et } \underset{\sim}{n} = \frac{3}{2}\,\frac{\underset{\sim}{s}_0^g - \underset{\sim}{X}}{J\left(\underset{\sim}{\sigma}_0^g - \underset{\sim}{X}\right)}$$

$$\underset{\sim}{\underset{\sim}{B}}_0^{g^{-1}} = \frac{n}{K}\left\langle \frac{f}{K} \right\rangle^{n-1} : \underset{\sim}{n} \otimes \underset{\sim}{n} + \left\langle \frac{f}{K} \right\rangle^n : \underset{\sim}{\underset{\sim}{N}}$$

$$\underset{\sim}{\underset{\sim}{B}}^g = \zeta_\alpha \left(\sum_i^{\text{Nvar}} \zeta_i \underset{\sim}{\underset{\sim}{B}}_i^g : \left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{I}} + \underset{\sim}{\underset{\sim}{\Gamma}}_1^{B(t-\Delta t)} : \delta\underset{\sim}{\underset{\sim}{b}}_i^g(t-\Delta t)\right]^{-1} \right) + (1-\zeta_\alpha)\ \underset{\sim}{\underset{\sim}{B}}_0^g : \left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{I}} + \underset{\sim}{\underset{\sim}{\Gamma}}_1^{B(t-\Delta t)} : \delta\underset{\sim}{\underset{\sim}{b}}_0^g(t-\Delta t)\right]^{-1} \quad \Rightarrow \quad \underset{\sim}{\underset{\sim}{B}} = \sum_g^{\text{Ngrain}} \zeta_g \underset{\sim}{\underset{\sim}{B}}^g$$

$$\delta\underset{\sim}{\underset{\sim}{b}}_i^g = \underset{\sim}{\underset{\sim}{B}}_i^g - \underset{\sim}{\underset{\sim}{B}}$$

$$\underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_i^{Bg} = \left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{I}} + \underset{\sim}{\underset{\sim}{\Gamma}}_1^B : \delta\underset{\sim}{\underset{\sim}{b}}_i^g\right]^{-1}, \quad \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_i^{Cg} = \left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{I}} + \left(\underset{\sim}{\underset{\sim}{R}}_{321} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{\Gamma}}_{1\alpha}^C : \underset{\sim}{\underset{\sim}{R}}_{321}^T\right)\left(\underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_i^g - \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}\right)\right]^{-1}$$

$$\delta\underset{\sim}{\underset{\sim}{b}}_0^g = \underset{\sim}{\underset{\sim}{B}}_0^g - \underset{\sim}{\underset{\sim}{B}}$$

$$\underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_0^{Bg} = \left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{I}} + \underset{\sim}{\underset{\sim}{\Gamma}}_1^B : \delta\underset{\sim}{\underset{\sim}{b}}_0^g\right]^{-1}, \quad \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_0^{Cg} = \left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{I}} + \underset{\sim}{\underset{\sim}{\Gamma}}_{1\beta}^C \left(\underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_0^g - \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}\right)\right]^{-1}$$

$$\left.\begin{aligned} \underset{\sim}{\underset{\sim}{M}}^g &= \zeta_\alpha \left(\sum_i^{\text{Nvar}} \zeta_i\ \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_i^{Cg} : \left(\underset{\sim}{\underset{\sim}{I}} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{R}}_{321} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{S}}_\alpha : \underset{\sim}{\underset{\sim}{R}}_{321}^T\right) : \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_i^{Bg} \right) + (1-\zeta_\alpha)\ \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_0^{Cg} : \left(\underset{\sim}{\underset{\sim}{I}} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{S}}_\beta\right) : \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_0^{Bg} \quad \Rightarrow \quad \underset{\sim}{\underset{\sim}{M}} = \sum_g^{\text{Ngrain}} \zeta_g\ \underset{\sim}{\underset{\sim}{M}}^g \\ \underset{\sim}{d}^g &= \zeta_\alpha \left(\sum_i^{\text{Nvar}} \zeta_i\ \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_i^{Cg} : \left(\underset{\sim}{\underset{\sim}{R}}_{321} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{\Gamma}}_{1\alpha}^C : \underset{\sim}{\underset{\sim}{R}}_{321}^T\right) : \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_i^g : \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_i^{vpg} \right) + (1-\zeta_\alpha)\ \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_0^{Cg} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{\Gamma}}_{1\beta}^C : \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_0^g : \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_0^{vpg} \quad \Rightarrow \quad \underset{\sim}{d} = \sum_g^{\text{Ngrain}} \zeta_g\ \underset{\sim}{d}^g \end{aligned}\right\} \quad \underset{\sim}{\dot{E}}^{vp} = \left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{I}} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{M}}\right]^{-1} : \underset{\sim}{d}$$

$$\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_i^g = \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_i^{Cg} : \left(\underset{\sim}{\dot{E}}^e + \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_i^{Bg} : \underset{\sim}{\dot{E}}^{vp}\right) + \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_i^{Cg} : \left(\underset{\sim}{\underset{\sim}{R}}_{321} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{\Gamma}}_{1\alpha}^C : \underset{\sim}{\underset{\sim}{R}}_{321}^T\right) : \left(\underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_i^g : \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_i^{vpg} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_i^{Cg} : \underset{\sim}{\dot{E}}^{vp}\right)$$

$$\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_i^{eg} = \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_i^g - \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_i^{vpg}$$

$$\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_0^g = \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_0^{Cg} : \left(\underset{\sim}{\dot{E}}^e + \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_0^{Bg} : \underset{\sim}{\dot{E}}^{vp}\right) + \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_0^{Cg} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{\Gamma}}_{1\beta}^C : \left(\underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}_0^g : \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_0^{vpg} - \underset{\sim}{\underset{\sim}{C}} : \underset{\sim}{\underset{\sim}{A}}_0^{Cg} : \underset{\sim}{\dot{E}}^{vp}\right)$$

$$\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_0^{eg} = \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_0^g - \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_0^{vpg}$$

Un des avantages du modèle réside dans la possibilité d'étudier la contribution de chacune des phases dans la déformation. La courbe Fig.3.40 montre les apports théoriques des phases α et β pour différentes fractions volumiques de phase et différentes tailles de précipités.

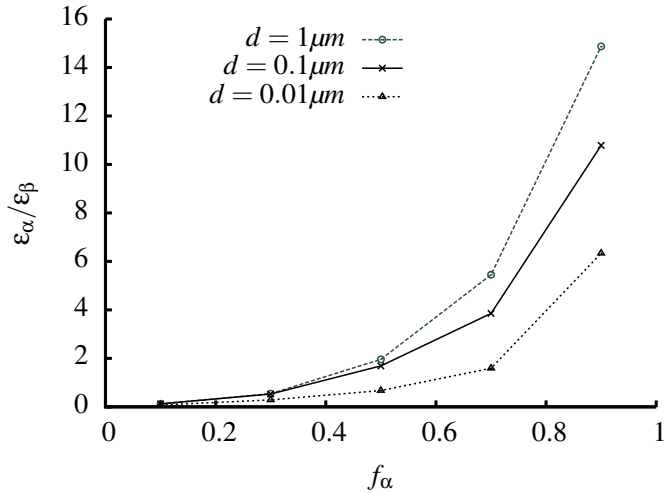


FIGURE 3.40 – Evolution du rapport entre les déformations dues à chacune des phases ($\varepsilon = \varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta$) en fonction de la fraction volumique de phase α

On peut voir que le résultat présenté ci-dessus est cohérent puisque pour une fraction volumique de phase α donnée, plus la taille des précipités est faible, plus la déformation dans ces derniers est restreinte à cause de l'effet de confinement. On montre en particulier les répartitions pour le matériau Ti17 Snecma (Fig.3.41) et le Ti5553 MBD (Fig.3.42). En comparaison avec les résultats pour le même essai du modèle des champs translatés en plasticité cristalline (cf. Fig.3.21 et Fig.3.22), les mêmes tendances sont constatées, mais les rapports de déformation entre phases sont plus favorables à la phase β dans le cas de la plasticité cristalline.

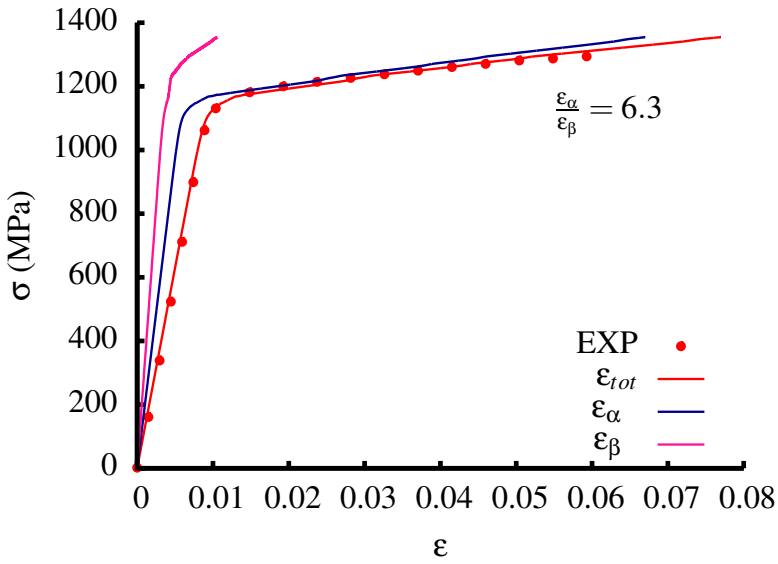


FIGURE 3.41 – Courbe de traction simulée et expérimentale pour le matériau Ti17 Snecma ($f_\alpha = 70\%$), et contributions de chacune des phases dans la simulation.

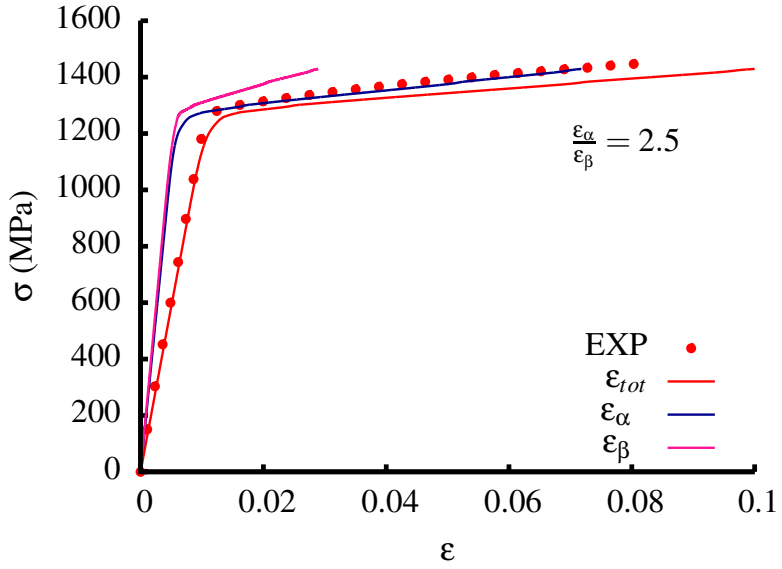


FIGURE 3.42 – Courbe de traction simulée et expérimentale pour le matériau Ti5553 MBD ($f_\alpha = 60\%$), et contributions de chacune des phases dans la simulation.

3.2.3 Application au modèle de Sabar et al. en plasticité anisotrope

On a vu que le modèle précédent était prometteur pour prédire les propriétés en traction d'un grand nombre de microstructures d'alliage de titane β-métastable. Néanmoins, l'utilisation du critère de von Mises conduit à une plasticité équivalente pour chaque inclusion, ce qui est d'ailleurs flagrant sur la figure 3.38. Une des limites du modèle est donc de pouvoir représenter uniquement les matériaux isotropes, ce qui était le cas pour toutes les microstructures étudiées jusqu'à présent. Dans cette section, on va explorer une méthode alternative qui permettra de représenter également les matériaux texturés, tout en conservant les fonctions polynomiales décrites précédemment.

La manière la plus rigoureuse pour représenter l'anisotropie plastique serait bien entendu de reprendre les modèles en plasticité cristalline présentés dans la section précédente (p.3.1.6 et p.3.1.6), en introduisant les fonctions polynomiales décrivant les relations microstructure – propriétés mécaniques dans les paramètres matériau des systèmes de glissement. Néanmoins, les solutions envisagées ici se veulent rapides en temps de calcul, et donc plus à même d'être réutilisées dans un cadre industriel. On s'oriente donc vers une solution alternative qui consiste à utiliser le critère de Hill (cf. (2.36)).
La question est à présent de savoir quel élément représentatif de l'anisotropie plastique peut être choisi. A ce titre, le grain β transformé semble être le choix le plus pertinent. Cependant, on sait que suivant les variants α que l'on considère, la réponse en déformation du grain β transformé peut beaucoup varier. Par défaut, l'inclusion considérée dans le schéma auto-cohérent sera une sphère ayant le comportement cubique de l'ex-grain β composé de la matrice β et des 12 variants α (Fig.3.27). On pourra alors utiliser le modèle de Sabar et al. pour les calculs, en considérant que pour un agrégat de grande taille, prendre 5 à 7 variants par ex-grain β ou les 12 variants conduit à la même réponse effective isotrope.

Dans le modèle, un critère de Hill sera donc attribué à chaque inclusion. Par analogie avec la rotation du tenseur de Schmid en plasticité cristalline, le tenseur $\underset{\sim}{\underset{\sim}{\mathcal{H}'}}$ sera lui aussi orienté par les angles d'Euler définissant l'orientation cristalline de la matrice β. Le tenseur

d'élasticité $\underset{\sim}{C}_g$, définissant l'élasticité du grain β non-orienté avec les 12 variants, dépendra uniquement des fractions volumiques des deux phases, et pourra être calculé dans une étape préliminaire à l'aide de l'équation (3.46), issue du schéma auto-cohérent de Hill.

$$\begin{aligned}\underset{\sim}{C}_{g\,(n+1)} = \; & (1-\zeta_\alpha)\,\underset{\sim}{C}_\beta : \left[\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{S}_\beta : \left(\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{C}^{-1}_{g\,(n)} : \underset{\sim}{C}_\beta\right)\right]^{-1} \\ & + \zeta_\alpha \sum_{i=1}^{12} \frac{1}{12}\,\underset{\sim}{C}_i : \left[\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{S}_i : \left(\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{C}^{-1}_{g\,(n)} : \underset{\sim}{C}_i\right)\right]^{-1}\end{aligned} \tag{3.46}$$

où $\underset{\sim}{C}_i$ et $\underset{\sim}{S}_i$ sont les tenseurs d'élasticité et d'Eshelby associés à chaque variant, qui peuvent se calculer à partir de $\underset{\sim}{C}_\alpha$ et $\underset{\sim}{S}_\alpha$ en reprenant les équations de changement de base (3.27) et (3.28), et en ne réalisant plus la rotation sur le grain β ($\underset{\sim}{R}_1 = \underset{\sim}{I}$).

Le paramétrage du modèle relève d'une double opération : l'anisotropie cubique doit être fixée à l'échelle du grain β transformé, avec l'aide des courbes simulées avec le modèle en plasticité cristalline dans plusieurs directions de sollicitation, et, dans le même temps, le modèle doit être capable de reproduire par homogénéisation le comportement isotrope à l'échelle de l'agrégat du Ti17 Snecma et du Ti5553 MBD (Fig.3.15 et Fig.3.16). La loi de comportement que nous proposons est la suivante :

$$f^{\mathcal{H}}(\underset{\sim}{\sigma}, \underset{\sim}{X}, R) = J^{\mathcal{H}}(\underset{\sim}{s} - \underset{\sim}{X}) - R_0 \tag{3.47}$$

$$\underset{\sim}{X} = \frac{2}{3}\left(C_0 + \frac{C}{2}\right)\underset{\sim}{\varepsilon}^{vp}_1 \quad (D=0) \tag{3.48}$$

où C_0 est une constante, au même titre que C_β dans le modèle précédent, tandis que C et R_0 sont les fonctions polynomiales définissant l'influence de la microstructure considérée. Les valeurs des paramètres matériau de ce modèle sont données dans le tableau 3.10.

	n	K (MPa.$s^{1/n}$)	A_0 (MPa)	C_0 (MPa)
Ti17	20	400	350	1100
Ti5553	20	520	300	1000

	H_1	H_2	H_3	H_4	H_5	H_6
Ti17	0.35	0.35	0.35	0.35	0.35	0.35
Ti5553	0.35	0.35	0.35	0.3	0.3	0.3

TABLE 3.10 – Paramètres matériaux pour le modèle basé sur le critère de Hill, A_0 correspond à la première constante de la fonction polynomiale R_0.

Du fait du comportement cubique en plasticité de cet ex-grain β particulier, l'expression du tenseur diagonal $\underset{\sim}{\mathcal{H}}'$ donnée dans l'équation (2.37) est simplifiée par les égalités suivantes : $H_1 = H_2 = H_3$ et $H_4 = H_5 = H_6$. On s'aperçoit en observant les courbes présentées ci-après (Fig.3.43 et Fig.3.44 pour le Ti17, Fig.3.45 et Fig.3.46 pour le Ti5553) qu'il est assez difficile de concilier les propriétés hétérogènes de l'échelle locale avec le comportement effectif du matériau. Un compromis satisfaisant a néanmoins été trouvé pour les deux alliages de titane β-métastable. On observe également que contrairement au critère de Hill, la plasticité cristalline met en évidence plusieurs pentes d'écrouissage, qui sont dues aux activations successives des différents systèmes de glissement.

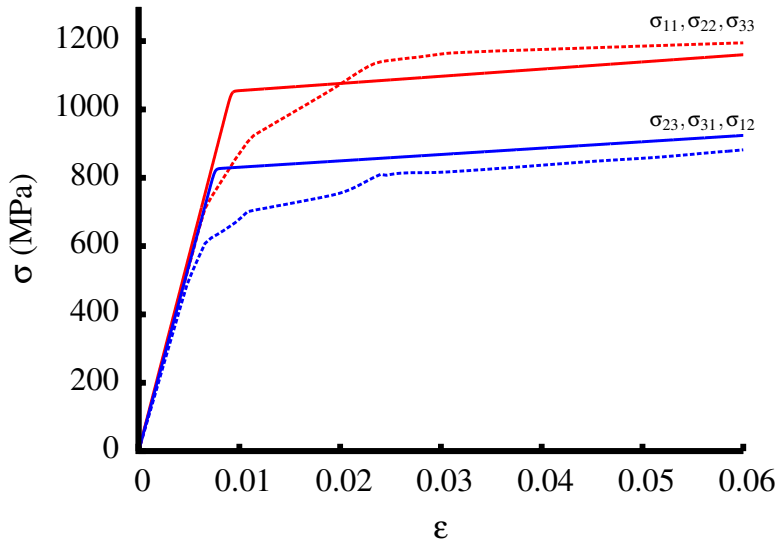


FIGURE 3.43 – Courbes obtenues avec le modèle en plasticité cristalline (traits discontinus, cf. Fig.3.27) et celui basé sur le critère de Hill (traits pleins) pour plusieurs sollicitations uniaxiales d'un ex-grain β en Ti17 Snecma non-orienté comprenant les 12 variants possibles. Les courbes rouges correspondent à des essais de traction uniaxiale suivant les contraintes principales, tandis que les courbes bleues représentes les essais équivalents en cisaillement.

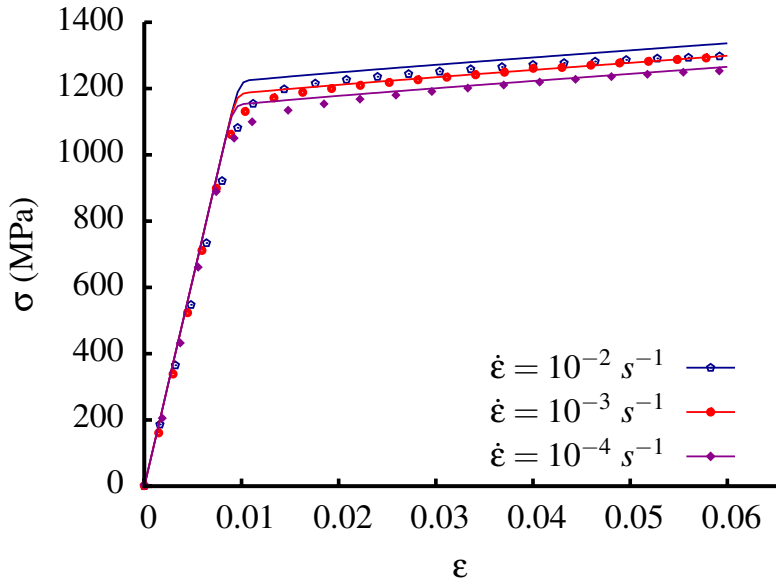


FIGURE 3.44 – Identification des paramètres matériau du critère de Hill par comparaison des courbes de traction uniaxiale simulées pour un agrégat de 100 ex-grains β et celles obtenues expérimentalement sur le Ti17 Snecma.

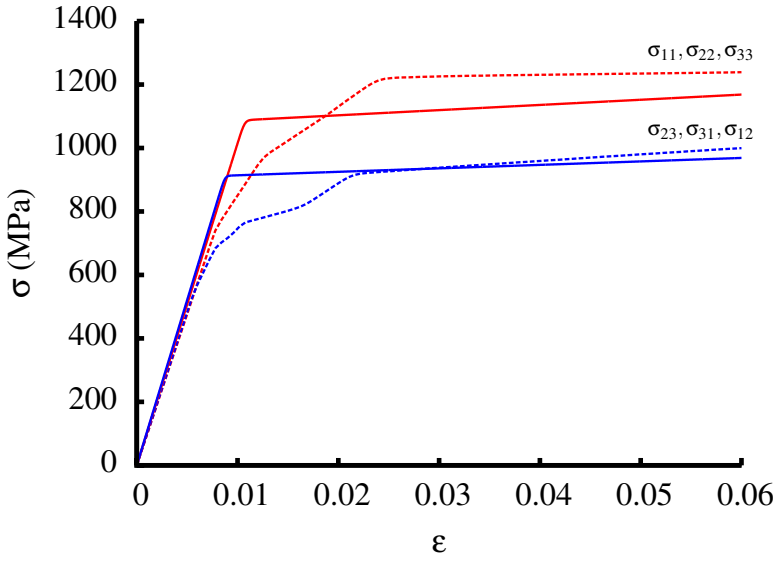


FIGURE 3.45 – Courbes obtenues avec le modèle en plasticité cristalline (traits discontinus) et celui basé sur le critère de Hill (traits pleins) pour plusieurs sollicitations uniaxiales d'un ex-grain β en Ti5553 MBD non-orienté comprenant les 12 variants possibles. Les courbes rouges correspondent à des essais de traction uniaxiale suivant les contraintes principales, tandis que les courbes bleues représentes les essais équivalents en cisaillement.

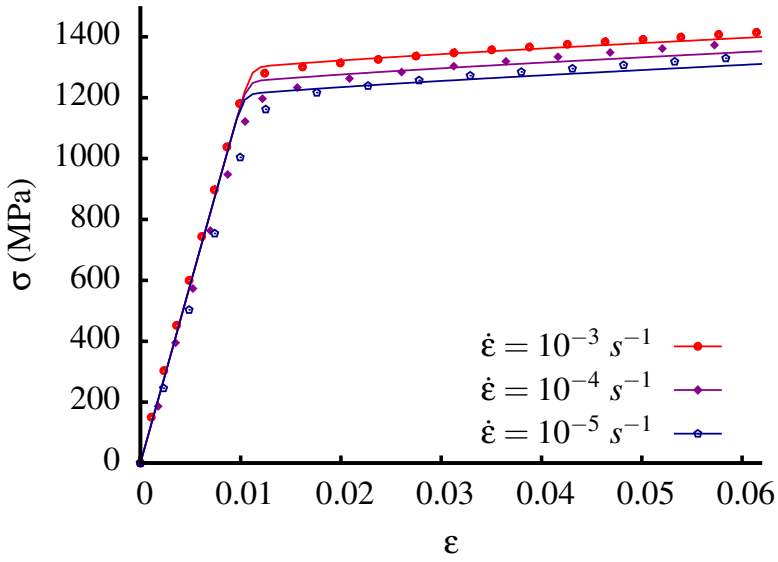


FIGURE 3.46 – Identification des paramètres matériau du critère de Hill par comparaison des courbes de traction uniaxiale simulées pour un agrégat de 100 ex-grains β et celles obtenues expérimentalement sur le Ti5553 MBD.

Il convient maintenant de savoir si le modèle est capable de reproduire avec précision l'anisotropie élasto-viscoplastique des alliages de titane β-métastable. Pour cela, on teste

dans un premier temps un seul ex-grain β cubique, en simulant avec le modèle les mêmes essais que ceux présentés dans les figures 3.29 et 3.28 dans le cadre de la plasticité cristalline. Il s'agit de prédire le comportement en traction uniaxiale pour différentes orientations de la matrice β vis-à-vis de l'axe de traction. Les courbes obtenues, qui sont montrées sur la figure 3.47 pour le Ti17 Snecma et sur la figure 3.48 pour le Ti5553 MBD, demeurent assez éloignées de celles calculées en plasticité cristalline. On retient néanmoins que le critère de Hill tel que nous l'avons identifié, permet de reproduire la bonne hiérarchie entre les directions $< 100 >_\beta$, $< 110 >_\beta$ et $< 111 >_\beta$.

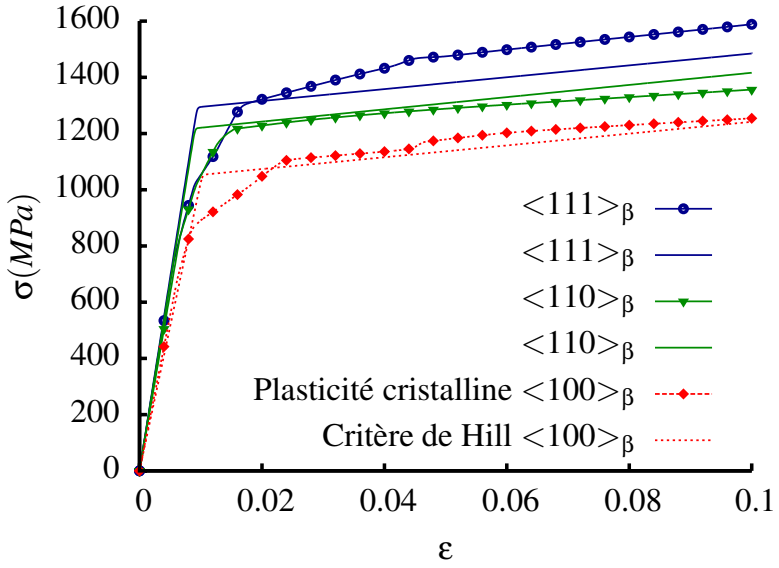


FIGURE 3.47 – Courbes de traction uniaxiale simulées pour un ex-grain β en Ti17 Snecma contenant de manière équiprobable les 12 variants α. Les directions de sollicitation coïncident avec une matrice β orientée $< 100 >_\beta$, $< 110 >_\beta$ ou $< 111 >_\beta$.

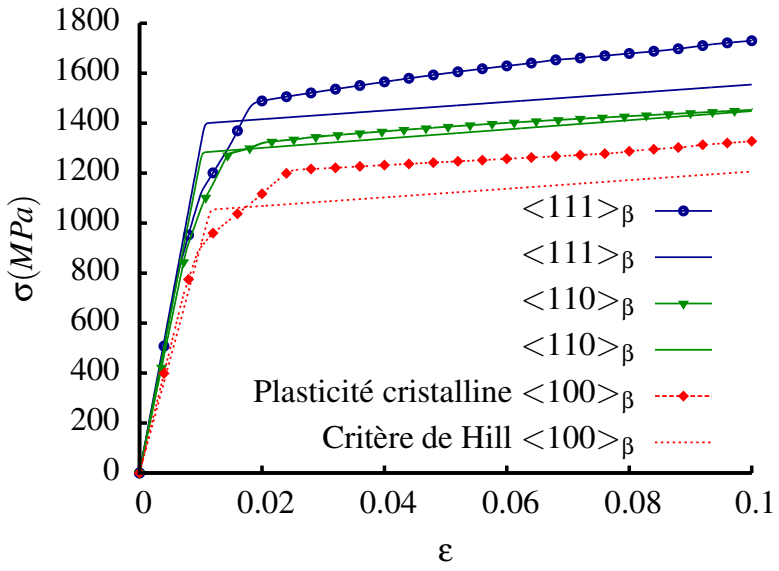


FIGURE 3.48 – Courbes de traction uniaxiale simulées pour un ex-grain β en Ti5553 MBD contenant de manière équiprobable les 12 variants α. Les directions de sollicitation coïncident avec une matrice β orientée $< 100 >_\beta$, $< 110 >_\beta$ ou $< 111 >_\beta$.

On évalue également les capacités du modèle pour des agrégats texturés. En l'absence d'essais expérimentaux sur des microstructures réellement texturées, la comparaison se fait avec des simulations effectuées avec le modèle des champs translatés en plasticité cristalline. Pour chaque texture, on fait 6 essais de traction uniaxiale à déformation imposée, selon les directions principales (σ_{11}, σ_{22} et σ_{33}) et en cisaillement (σ_{23}, σ_{31} et σ_{12}). Les composantes non imposées correspondent à des contraintes nulles.
Les agrégats, représentés en champs moyens par un unique point de Gauss, se composent de 50 ex-grains β en Ti17 Snecma. Pour le modèle en plasticité cristalline, on reprend les paramètres matériau de la table 3.6 et on continue de considérer 5 à 7 variants α avec des fractions volumiques aléatoires.

Dans un premier temps, on considère que tous les ex-grains β se trouvent dans une configuration proche du repère matériau (désorientation de $\pm 15^\circ$). Les courbes de traction uniaxiale obtenues sont présentées dans la figure 3.49.

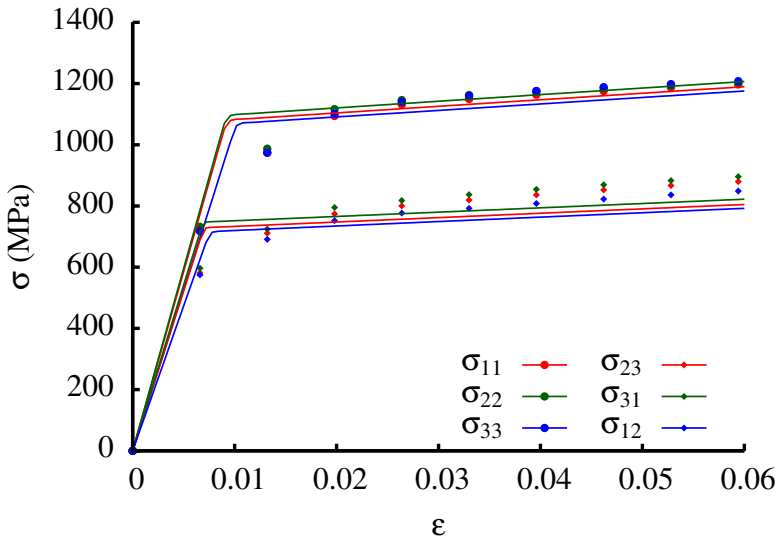
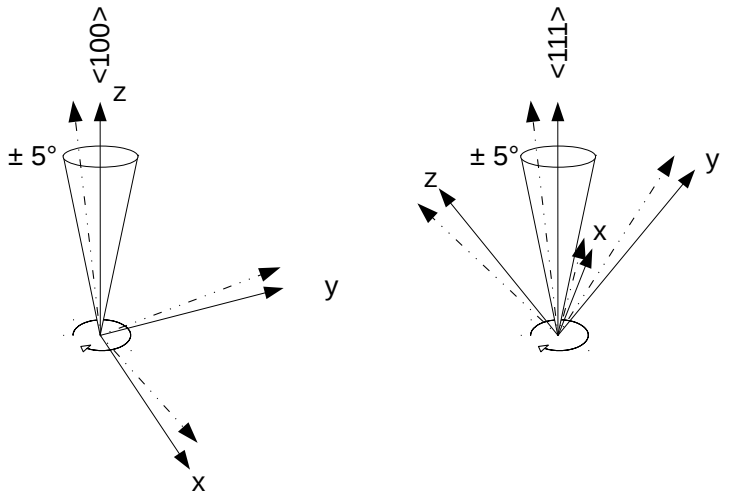


FIGURE 3.49 – Texture $\{\varphi_1 = 0^\circ,\ \Phi = 0^\circ,\ \varphi_2 = 0^\circ\}\ \pm 15^\circ$: les points représentent les simulations effectuées à $10^{-3}s^{-1}$ avec le modèle en plasticité cristalline, tandis que les traits pleins correspondent aux simulations obtenues avec le modèle basé sur le critère de Hill et les fonctions morphologiques d'écrouissage.

Dans un second temps, on procède à des simulations sur trois textures quelconques. Chaque texture est obtenue en contraignant les angles d'Euler produits par le générateur d'orientations aléatoires présenté page 64. Les angles d'Euler choisis et les prévisions du critère de Hill par rapport à la plasticité cristalline, sont présentés dans les figures qui suivent (Fig.3.51, Fig.3.52 et Fig.3.53).

Dans un dernier temps, on cherche à se rapprocher d'une texture qui peut apparaître lors des mises en forme industrielles. Dans les travaux de thèse de [Delfosse, 2005], il est montré, au travers de calculs numériques sur des agrégats 3D, que le forgeage du Ti17 sous presse fait ressortir des directions $< 111 >_\beta$ et $< 100 >_\beta$ suivant l'axe de forgeage. Dans ces résultats, la texture reste minoritaire : sur l'ensemble des orientations β, on retrouve environ 25% d'ex-grains β orientés $< 111 >_\beta$ et environ 13% d'ex-grains β orientés $< 100 >_\beta$. On propose ici de reprendre cette texture en l'exacerbant avec 80% d'ex-grains β orientés $< 111 >_\beta$ et 20% d'ex-grains β orientés $< 100 >_\beta$. Pour éviter que les orientations ne soient

pas toutes exactement identiques, on impose une variation maximale de $\pm 5^\circ$ par rapport à la direction souhaitée (Fig.3.50). Les courbes simulées pour cette texture avec le modèle des champs translatés basé sur le critère de Hill, et celui basé sur la plasticité cristalline, sont présentées sur la figure 3.54.



$\varphi_1 = [0-360^\circ],\ \Phi = \pm 5^\circ,\ \varphi_2 = 0^\circ$ $\qquad$ $\varphi_1 = [0-360^\circ],\ \Phi = 54.74^\circ,\ \varphi_2 = 45^\circ \pm 5^\circ$

FIGURE 3.50 – Définition du repère local (x,y,z) de la phase β pour un alignement parfait (flèches en trait plein), et pour une désorientation de $\pm 5^\circ$ (flèches au trait discontinu).

Au regard des 5 textures testées (figures 3.49, 3.51, 3.52, 3.53 et 3.54), on constate que le modèle donne des résultats assez proches de ceux obtenus avec le modèle en plasticité cristalline. Pour toutes les textures, on remarque que le caractère anisotrope décrit par le critère de Hill est qualitativement identique à celui obtenu en plasticité cristalline. Par exemple, pour la texture qui se veut représentative du forgeage (Fig.3.54) le résultat semble cohérent :

- lorsque l'on sollicite l'agrégat dans la direction de forgeage (x_3), on obtient pour les deux modèles la meilleure résistance mécanique, ce qui est logique puisque la direction $< 111 >_\beta$ y est majoritaire ;

- les sollicitations suivant l'axe x_1 ou x_2 donnent des résultats identiques, ce qui s'explique par le fait que dans ces deux directions l'agrégat présente des orientations cristallographiques complètement aléatoires. On retrouve alors le comportement isotrope caractéristique du Ti17 Snecma (Fig.3.44).

Au point de vue quantitatif, les résultats paraissent globalement satisfaisants, même si on constate d'importants écarts pour une des textures (Fig.3.52). On note que le ratio σ/τ est plus important pour les agrégats texturés (proche de la valeur prédite par le critère de Tresca) que pour l'ex-grain β "cubique" pris dans le référentiel matériau (cf. Fig.3.27), c'est d'ailleurs pour la texture qui a le plus grand ratio σ/τ que l'on a le plus grand écart par rapport à la plasticité cristalline. Une identification plus poussée des paramètres matériau, et notamment des composantes du tenseur $\underset{\sim}{\mathcal{H}}'$, pourrait certainement permettre au modèle d'obtenir une plus grande précision.

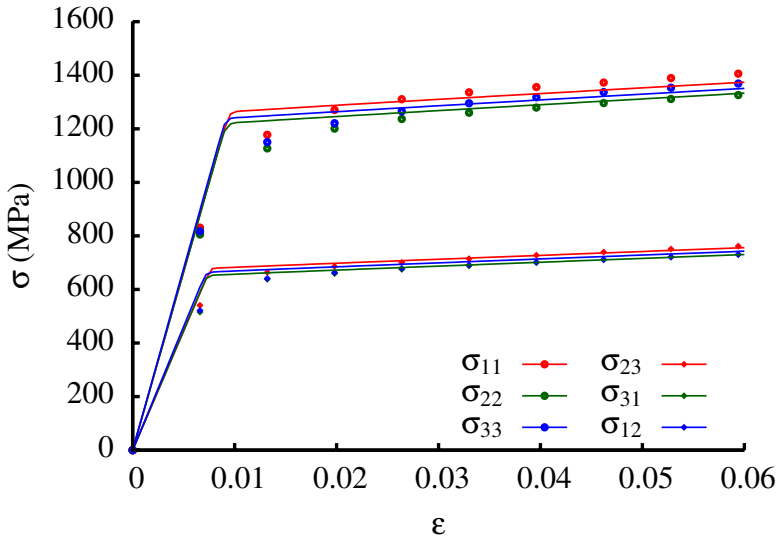


FIGURE 3.51 – Texture $\{\varphi_1 = 40°,\ \Phi = 50°,\ \varphi_2 = 20°\}\ \pm 15°$: les points représentent les simulations effectuées à $10^{-3}s^{-1}$ avec le modèle en plasticité cristalline, tandis que les traits pleins correspondent aux simulations obtenues avec le modèle basé sur le critère de Hill et les fonctions morphologiques d'écrouissage.

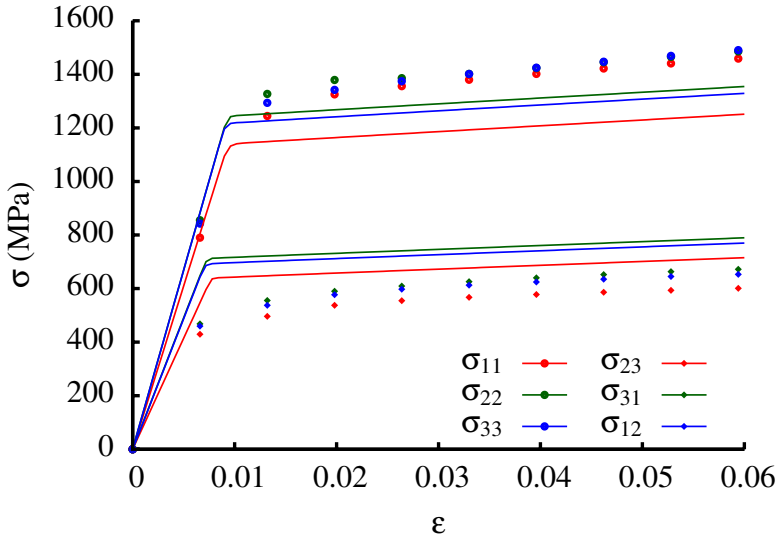


FIGURE 3.52 – Texture $\{\varphi_1 = 10°,\ \Phi = 45°,\ \varphi_2 = 10°\}\ \pm 15°$: les points représentent les simulations effectuées à $10^{-3}s^{-1}$ avec le modèle en plasticité cristalline, tandis que les traits pleins correspondent aux simulations obtenues avec le modèle basé sur le critère de Hill et les fonctions morphologiques d'écrouissage.

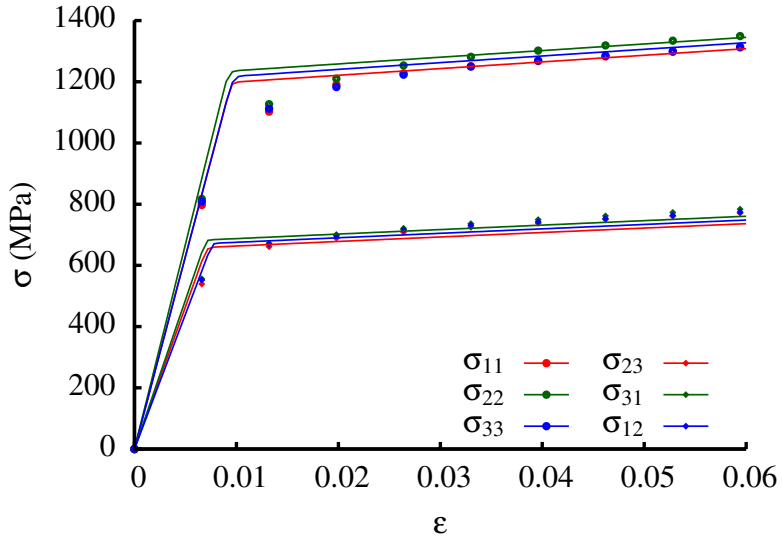


FIGURE 3.53 – Texture $\{\varphi_1 = 60°,\ \Phi = 75°,\ \varphi_2 = 35°\}\ \pm 10°$: les points représentent les simulations effectuées à $10^{-3}s^{-1}$ avec le modèle en plasticité cristalline, tandis que les traits pleins correspondent aux simulations obtenues avec le modèle basé sur le critère de Hill et les fonctions morphologiques d'écrouissage.

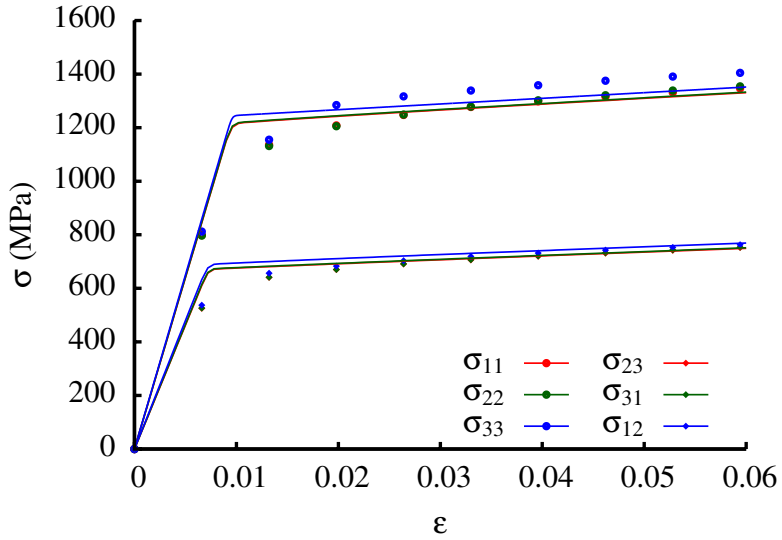


FIGURE 3.54 – Texture $< 111 >_\beta + < 100 >_\beta$ dans l'axe de forgeage (x_3) : les points représentent les simulations effectuées à $10^{-3}s^{-1}$ avec le modèle en plasticité cristalline, tandis que les traits pleins correspondent aux simulations obtenues avec le modèle basé sur le critère de Hill et les fonctions morphologiques d'écrouissage.

Pour conclure, il faut également mettre en avant l'autre facette du modèle qui vient d'être mis en place : sa capacité à adapter ses paramètres matériau en fonction de la microstructure. On reprend dans ce contexte les microstructures d'étude en Ti17 et Ti5553 (Tab.1.7 et Tab.1.9). Contrairement au premier modèle (cf. 3.2.2), où l'on pouvait se contenter d'un agrégat de 10 ex-grains β pour la simulation (Fig.3.38), on doit cette fois-ci prendre au moins 100 ex-grains β afin de s'assurer d'obtenir un résultat représentatif.
Les résultats reportés sur la figure 3.55 montrent que le modèle reste assez précis, même s'il demeure relativement moins efficace que le premier modèle (Fig.3.39).

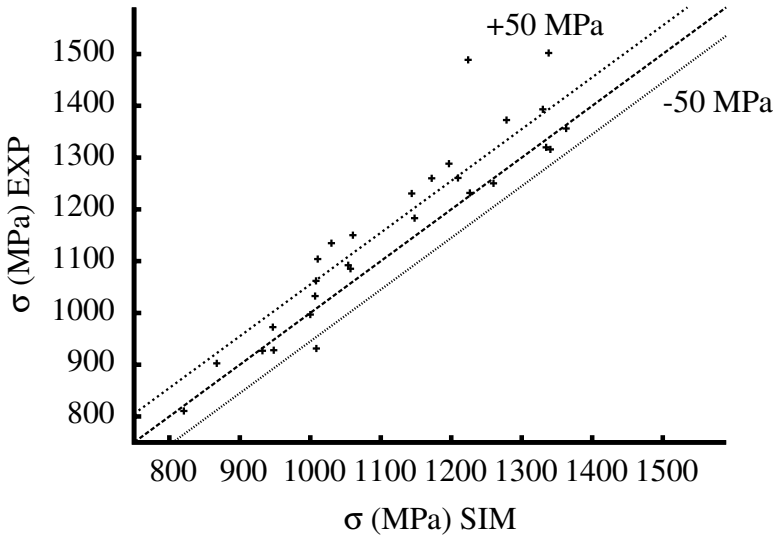


FIGURE 3.55 – Contraintes simulées et expérimentales à 3% de déformation totale issues des courbes de traction uniaxiale pour les différentes microstructures étudiées.

3.3 Discussion

On a pu vérifier dans ce chapitre que le choix de l'opérateur tangent local pose un problème lors d'une opération d'homogénéisation avec un comportement élasto-viscoplastique (cf. modèle ACAVP). On a donc été amené à utiliser, avec succès, le modèle de Sabar et al., qui contourne le problème de l'opérateur tangent, en découplant la partie élastique de la partie viscoplastique. On revient néanmoins dans cette section au schéma auto-cohérent proposé par Hill avec l'idée que si l'opérateur tangent proposé en (2.75) ne donne pas la réponse en déformation souhaitée (cf Fig.3.6.b), il peut exister une autre expression conduisant à des interactions inclusion / matrice plus faibles.
Dans cette optique, l'opérateur tangent défini pour le cas non visqueux (2.73) semble être un candidat plausible, il avait servi par exemple de base à la régularisation (2.178) proposée par [?]. La loi de comportement élasto-viscoplastique attribuée aux inclusions est conservée, mais les interactions inclusion / matrice sont traitées de manière élasto-plastique. On parle alors de schéma auto-cohérent avec une loi de comportement élasto-viscoplastique et une accommodation de type élasto-plastique (ACAP).

Pour évaluer cette solution, on peut reprendre le calcul sur l'agrégat 100% β, dont le comportement élasto-viscoplastique est décrit par les paramètres matériau de la table 3.3. L'approche incrémentale présentée en (3.23) sera reprise, et le résultat sera comparé à ceux déjà présentés pour les autres modèles dans la figure 3.6b. L'écart relatif par rapport à la solution de référence du calcul éléments finis se trouve être réduit par rapport à celui obtenu pour le modèle ACAVP, et proche de celui obtenu pour le modèle de Sabar et al. Comme on peut le voir sur la figure 3.56, le modèle ACAP donne une surestimation de 2% des contraintes internes, tandis que le modèle de Sabar et al. les sous-estime de 2%.

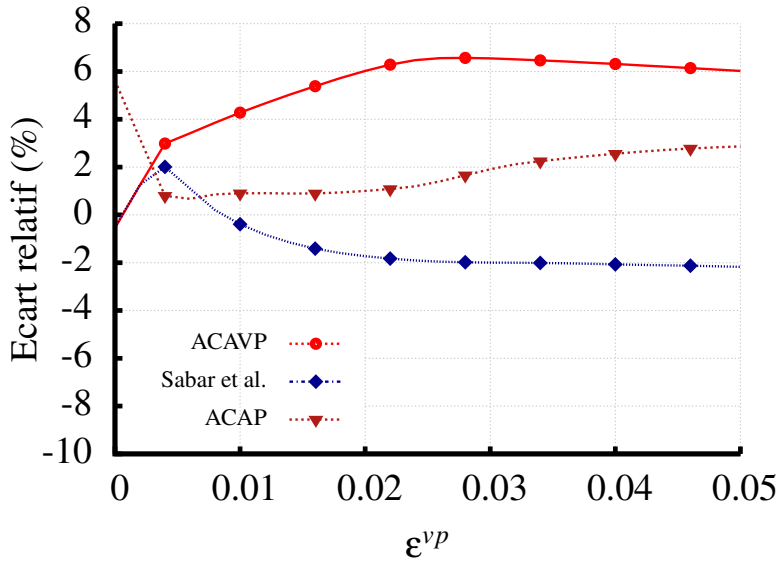


FIGURE 3.56 – Comparaison des différents modèles pour un agrégat 100% β.

Ce résultat est encourageant mais il a été obtenu pour une loi de comportement simple : l'écrouissage étant représenté uniquement par un terme cinématique linéaire (c), ce qui conduit à une expression simple de la matrice tangente (2.71). On teste à présent le modèle ACAP pour un matériau octaédrique fictif, avec une loi de comportement locale plus complexe (Tab.3.11). La courbe contrainte – déformation obtenue pour l'essai de traction

uniaxiale est de nouveau comparée à celles qui sont obtenues avec les deux autres modèles, ainsi qu'avec la moyenne calculée sur un agrégat Voronoï périodique de 100 grains (Fig.3.57).

C_{1111} (MPa)	C_{1122} (MPa)	C_{2323} (MPa)
270	165	115

	n	K (MPa.$s^{1/n}$)	τ_c^s (MPa)	c (MPa)	d	Q (MPa)	b	h_{ij}
Fig.3.57	30	250	330	450 000	3000	95	5	1
Fig.3.59	30	250	330	4500	0	0	0	0

TABLE 3.11 – Paramètres matériaux fictifs.

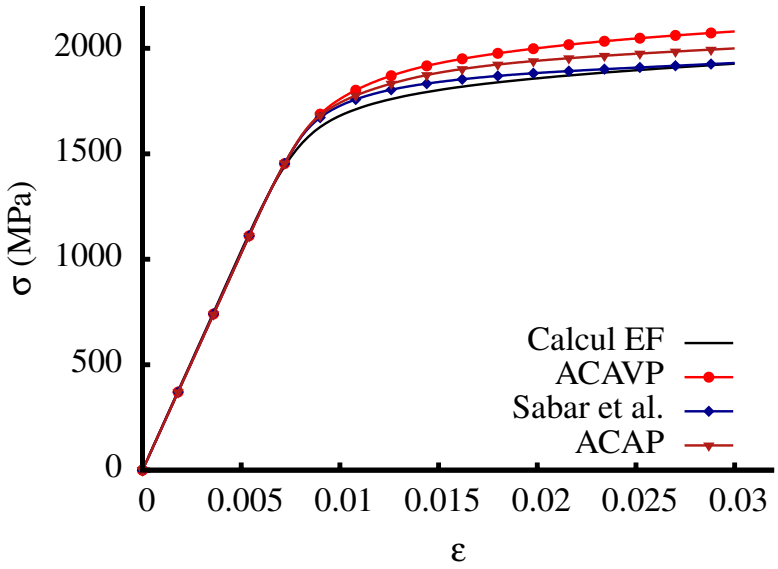


FIGURE 3.57 – Comparaison entre les courbes de traction uniaxiale ($\dot{\varepsilon} = 3.10^{-3} s^{-1}$) obtenues pour l'agrégat Voronoï, et les modèles à champs moyens étudiés dans cette discussion.

Avec cette nouvelle loi de comportement, l'utilisation de l'opérateur tangent élasto-plastique en lieu et place de l'opérateur élasto-viscoplastique dans le schéma auto-cohérent de Hill permet d'améliorer les interactions intergranulaires, et donc la réponse en déformation. Néanmoins, sur ce dernier exemple (Fig.3.57), la courbe σ–ε obtenue avec le modèle ACAP est assez éloignée du calcul EF, au contraire de celle calculée avec le modèle de Sabar et al., qui reste par conséquent le plus pertinent.
On peut supposer à première vue que c'est la viscosité qui est responsable de cet écart. Pour confirmer cette hypothèse, les mêmes calculs sont effectués avec une viscosité très faible ($n = 30$, $K = 25$ MPa) et une viscosité très élevée ($n = 3$, $K = 250$ MPa). Les résultats, présentés sur la figure 3.58, montrent qu'un écart similaire est obtenu pour ces deux nouveaux matériaux fictifs. On peut donc conclure que le surplus de contraintes internes dans le modèle ne provient pas de l'association entre la loi de comportement élasto-viscoplastique et la matrice tangente élasto-plastique. En réalité, cette différence apparaît comme inhérente aux modèles à champs moyens. En effet, lorsque l'on travaille avec le même matériau octaédrique mais dans un cas non visqueux, ce qui nous permet d'utiliser le modèle de Hill et une loi

de comportement élasto-plastique (cf. section 2.3), on observe également une différence importante en contrainte – déformation par rapport au calcul équivalent en éléments finis. La différence avec le calcul EF a donc probablement une origine plus générale. On pense notamment, parmi les explications possibles, au fait que les modèles à champs moyens ne prennent pas en compte les déformations intragranulaires au contraire des champs complets.

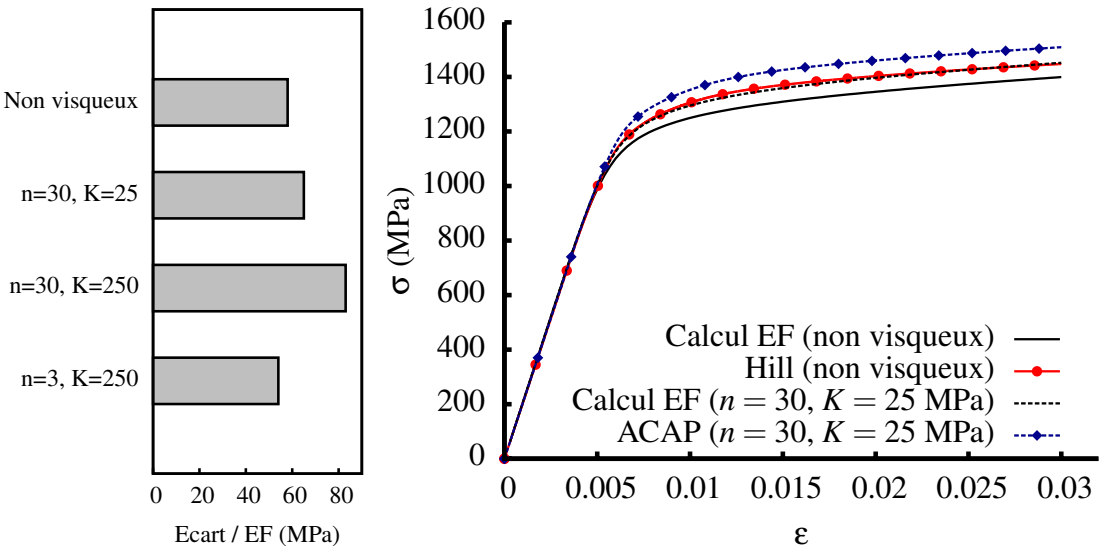


FIGURE 3.58 – Comparaison entre les courbes de traction uniaxiale ($\dot{\varepsilon} = 3.10^{-3} s^{-1}$) obtenues pour l'agrégat Voronoï, et les modèles de Sabar et al. et Hill.

Malgré cela, le modèle ACAP reste très pertinent lorsque c est la seule variable d'écrouissage. En reprenant le matériau fictif octaédrique et en simplifiant la loi de comportement locale (c = 4500 MPa, $d = Q = 0$), le résultat est proche du calcul EF (Fig.3.59), comme c'était également le cas avec l'agrégat 100% β.

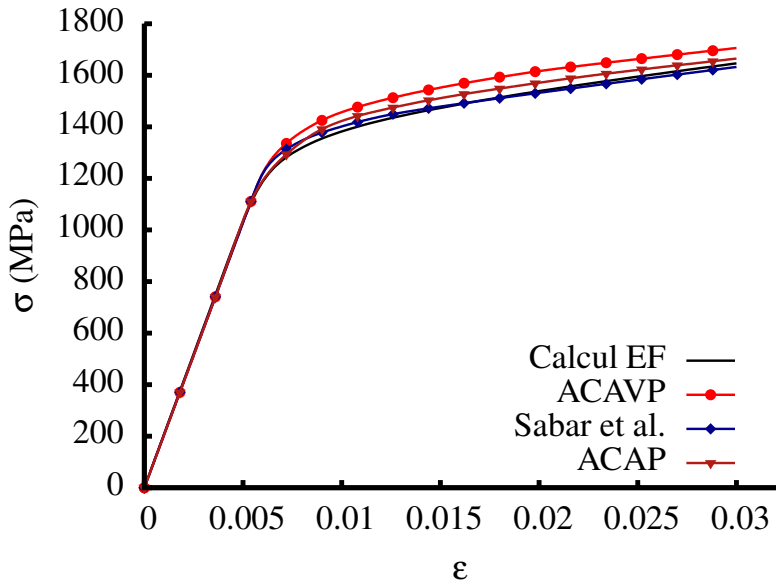


FIGURE 3.59 – Comparaison entre les courbes de traction uniaxiale ($\dot{\varepsilon} = 3.10^{-3} s^{-1}$) obtenues pour l'agrégat Voronoï, et les modèles de Sabar et al., ACAVP et ACAP. Les paramètres matériau sont donnés dans le tableau 3.11.

On peut alors adapter le modèle ACAP aux alliages de titane biphasés, comme cela a été fait avec le modèle de Sabar et al. On reprend dans le modèle plusieurs morphologies d'inclusion au travers de la rotation du tenseur d'Eshelby, de la même manière qu'en élasticité (cf. (3.26), (3.28)). L'algorithme pour ce nouveau modèle est présenté dans la page 115. La simulation de traction à une vitesse de $10^{-4}s^{-1}$ pour le Ti5553 MBD est reproduite pour évaluer le modèle ACAP dans cette nouvelle configuration, en reprenant les paramètres matériau identifiés pour le modèle des champs translatés (Tab.3.6), lequel servira d'élément de comparaison. Les courbes de la figure 3.60 montrent que ce nouveau modèle donne un résultat moins quantitatif vis à vis de l'expérience, mais que l'on peut considérer comme acceptable.

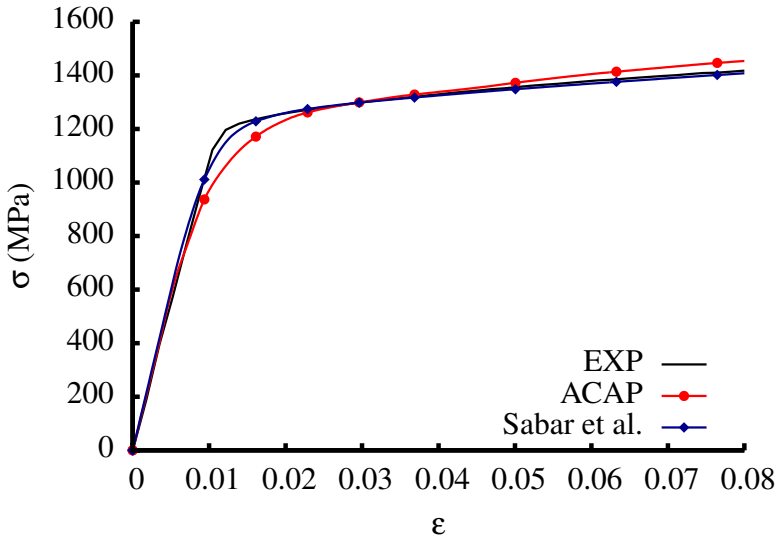


FIGURE 3.60 – Comparaison des modèles pour le Ti5553 MBD dans le cas d'une traction uniaxiale à $10^{-4}s^{-1}$.

Algorithme : ACAP (Plasticité cristalline)

Variant α $(i = 1..\text{Nvar})$

$$\underset{\sim}{\sigma}_i^g = \underset{\sim}{C}_i^g : \underset{\sim}{\varepsilon}_i^{eg} \quad \text{avec } \underset{\sim}{C}_i^g = \left[\underset{\sim}{R}_{21} : \underset{\sim}{C}_\alpha : \underset{\sim}{R}_{21}^T\right]$$

$$\tau^s = \underset{\sim}{\sigma}_i^g : \underset{\sim}{m}_i^s \quad \text{avec } \underset{\sim}{m}_i^s = \left[\underset{\sim}{R}_{21} : \underset{\sim}{m}_\alpha^s : \underset{\sim}{R}_{21}^T\right]$$

$$\dot{\varepsilon}_i^{vpg} = \sum_{s\in i}^{N_s} \dot{\upsilon}^s \eta^s \underset{\sim}{m}_i^s \quad \text{avec } \dot{\upsilon}^s = \left\langle \frac{|\,\tau^s - x^s\,| - r^s}{K} \right\rangle^n$$

$$\underset{\sim}{L}_i^g = \underset{\sim}{C}_i^g - \sum_{s\in i}^{N_s}\sum_{r\in i}^{N_s} \eta^s \eta^r p_{sr} \left(\underset{\sim}{C}_g^i : \underset{\sim}{m}^s\right) \otimes \left(\underset{\sim}{C}_i^g : \underset{\sim}{m}^r\right)$$

$$\underset{\sim}{A}_i^g = \left[\underset{\sim}{I} - \left(\underset{\sim}{R}_{321} : \underset{\sim}{S}_\alpha : \underset{\sim}{R}_{321}^T\right) : \left(\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{L}^{eff}(t-\Delta t) : \underset{\sim}{L}_i^g\right)\right]^{-1}$$

Matrice β $(i = 0)$

$$\underset{\sim}{\sigma}_0^g = \underset{\sim}{C}_0^g : \underset{\sim}{\varepsilon}_0^{eg} \quad \text{avec } \underset{\sim}{C}_0^g = \left[\underset{\sim}{R}_1 : \underset{\sim}{C}_\beta : \underset{\sim}{R}_1^T\right]$$

$$\tau^s = \underset{\sim}{\sigma}_0^g : \underset{\sim}{m}_0^s \quad \text{avec } \underset{\sim}{m}_0^s = \left[\underset{\sim}{R}_1 : \underset{\sim}{m}_\beta^s : \underset{\sim}{R}_1^T\right]$$

$$\dot{\varepsilon}_0^{vpg} = \sum_{s\in 0}^{N_s} \dot{\upsilon}^s \eta^s \underset{\sim}{m}_0^s \quad \text{avec } \dot{\upsilon}^s = \left\langle \frac{|\,\tau^s - x^s\,| - r^s}{K} \right\rangle^n$$

$$\underset{\sim}{L}_0^g = \underset{\sim}{C}_0^g - \sum_{s\in 0}^{N_s}\sum_{r\in 0}^{N_s} \eta^s \eta^r p_{sr} \left(\underset{\sim}{C}_0^g : \underset{\sim}{m}^s\right) \otimes \left(\underset{\sim}{C}_0^g : \underset{\sim}{m}^r\right)$$

$$\underset{\sim}{A}_0^g = \left[\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{S}_\beta : \left(\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{L}^{eff}(t-\Delta t) : \underset{\sim}{L}_0^g\right)\right]^{-1}$$

$$\underset{\sim}{L}^g = \zeta_\alpha \left(\sum_i^{\text{Nvar}} \zeta_i \underset{\sim}{L}_i^g : \underset{\sim}{A}_i^g\right) + (1-\zeta_\alpha)\ \underset{\sim}{L}_0^g : \underset{\sim}{A}_0^g \quad \Rightarrow \quad \underset{\sim}{L}^{eff} = \sum_g^{\text{Ngrain}} \zeta_g \underset{\sim}{L}^g$$

$$\underset{\sim}{A}_i^g = \left[\underset{\sim}{I} - \left(\underset{\sim}{R}_{321} : \underset{\sim}{S}_\alpha : \underset{\sim}{R}_{321}^T\right) : \left(\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{L}^{eff} : \underset{\sim}{L}_i^g\right)\right]^{-1}$$

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_i^g = \underset{\sim}{A}_i^g : \dot{\underset{\sim}{E}}$$

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_i^{eg} = \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_i^g - \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_i^{vpg}$$

$$\underset{\sim}{A}_0^g = \left[\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{S}_\beta : \left(\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{L}^{eff} : \underset{\sim}{L}_0^g\right)\right]^{-1}$$

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_0^g = \underset{\sim}{A}_0^g : \dot{\underset{\sim}{E}}$$

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_0^{eg} = \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_0^g - \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}_0^{vpg}$$

3.4 Conclusions partielles

Dans ce chapitre, des modèles numériques permettant de représenter à plusieurs échelles le comportement mécanique à température ambiante des alliages de titane β-métastable ont été mis en place. Du fait de la microstructure complexe du Ti5553 et du Ti17, et des relations particulières qui existent entre les phases α et β, l'utilisation des méthodes éléments finis est restreinte. Les modèles à champs moyens, présentés dans le chapitre 2, ont donc été adaptés de manière à pouvoir prédire efficacement le comportement élasto-viscoplastique des différentes microstructures étudiées. Des modèles complexes, faisant intervenir la plasticité cristalline, sont utilisés pour reproduire de manière précise les essais mécaniques effectués sur les microstructures particulières du Ti17 Snecma et du Ti5553 MBD. D'autres modèles, plus simples, vont permettre de mettre en valeur des fonctions polynomiales représentatives des relations microstructure - propriétés mécaniques dans les alliages de titane β-métastable, de manière à pouvoir donner une estimation des propriétés en traction de n'importe quelle type de microstructure en Ti17 et en Ti5553, même texturée. Ces modèles doivent encore être validés et améliorés, en les testant sur une plus grande plage de données microstructurales, notamment dans un cadre industriel.

Tous les modèles présentés dans ce chapitre reposent bien évidemment sur un certain nombre d'hypothèses et de simplifications. Tout au long de leurs développements, on a veillé de manière rigoureuse à la fiabilité des résultats et des méthodes utilisées, en mettant l'accent sur le respect de l'auto-cohérence lors de l'homogénéisation. A ce titre, la possibilité d'adapter le modèle de Hill en élasto-viscoplasticité a été envisagée, puis discutée dans la section 3.3.

Si des modèles ont donc été mis à disposition pour permettre de modéliser le comportement des alliages de titane β-métastable, aucune réflexion n'a jusqu'à présent été faite sur les mécanismes de déformation et le rôle de chacune des phases dans la déformation. On va donc dans le chapitre suivant utiliser notre approche numérique pour essayer de comprendre comment ces alliages se déforment, et quels sont les éléments clés de cette déformation.

Chapitre 4

Homogénéisation locale du grain β transformé, couplage avec les éléments finis

Dans ce chapitre, une attention particulière est portée sur l'échelle des ex-grains β, et sur leur rôle dans la déformation. Le travail mené par [Duval, 2012], brièvement présenté dans la section 1.5.2, a permis de mettre en évidence le fait que la déformation est relativement homogène au sein de chaque grain β transformé, et que le niveau de déformation peut atteindre des valeurs très différentes d'un grain à un autre. En conséquence, l'échelle des grains β transformé semble être une échelle pertinente pour étudier les mécanismes de déformation.
Dans ce contexte, l'approche numérique permet de mieux comprendre ce qui gouverne la déformation, et de mettre en évidence le rôle tenu par chacune des phases dans le processus. Dans ce cadre, la simulation d'un essai de micro-traction sur une éprouvette plate très fine est proposée, puis comparée à l'essai expérimental d'origine effectué par [Duval, 2012], dont les résultats sont partiellement présentés en figure 1.32.

4.1 Présentation de l'étude numérique

4.1.1 Description de l'expérience et de son adaptation dans un calcul EF

L'éprouvette en Ti17 Snecma qui a été testée expérimentalement [Duval, 2012] possède une partie utile de 10 mm de longueur, 2 mm de largeur et seulement 920 μm d'épaisseur. Les autres longueurs caractéristiques peuvent être retrouvées sur la figure 4.1.

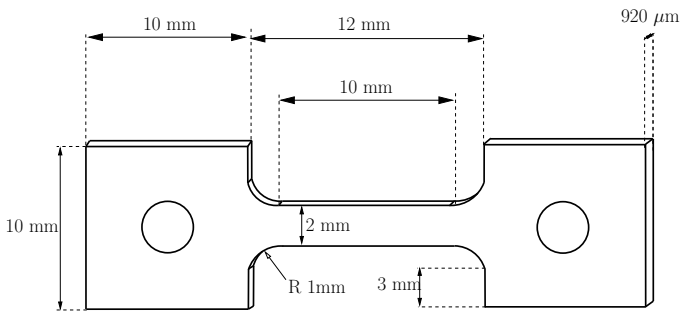


FIGURE 4.1 – Schéma représentatif de l'éprouvette.

Les orientations des ex-grains β des deux surfaces de la partie utile ont pu être mesurées au MEB-EBSD (Fig.4.2). Une grande diversité de tailles et d'orientations cristallographiques peut être remarquée. On note également qu'aucune texture n'apparaît en surface.

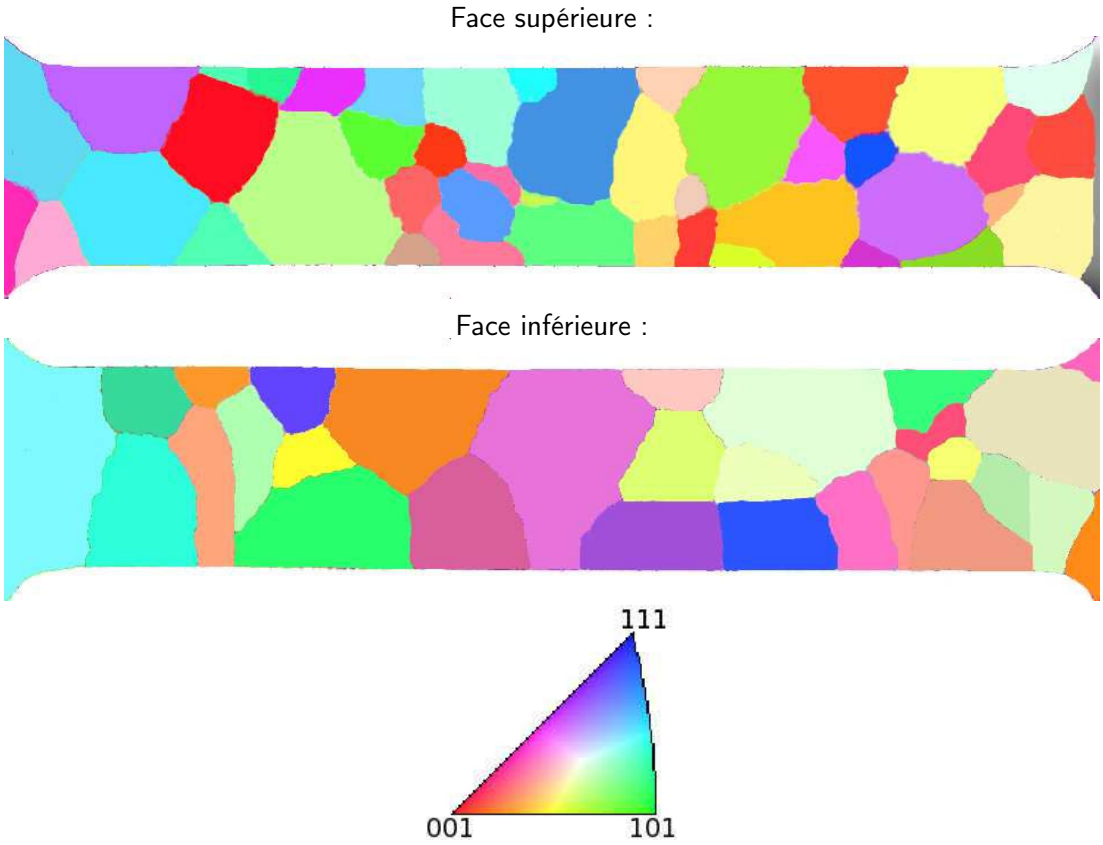


FIGURE 4.2 – Cartes EBSD des orientations cristallographiques de la phase β dans la direction de traction pour les deux faces de l'éprouvette, [Duval, 2012].

A partir de ces cartes EBSD, il est possible de construire un maillage éléments finis 2D. Pour cela, la démarche est la suivante :

1. Dans un premier temps, l'image EBSD d'origine est retraitée de manière à uniformiser les couleurs des pixels dans chaque ex-grain β. Les couleurs initialement attribuées par l'analyse EBSD sont ensuite remplacées par des couleurs labellisées, plus facile à traiter pour la suite (Fig.4.3) ;

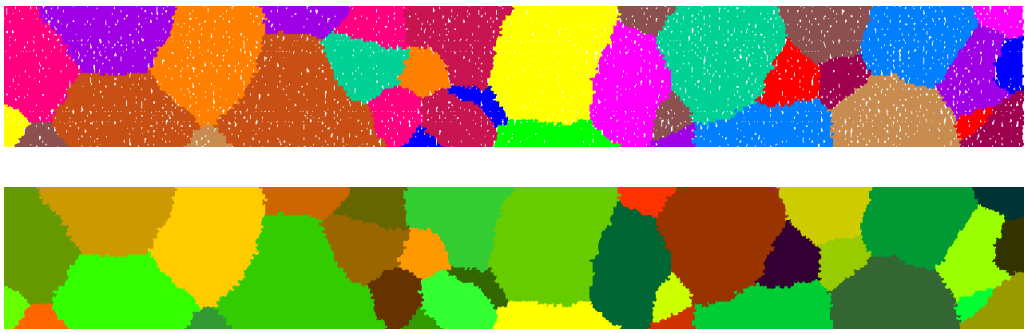


FIGURE 4.3 – Carte EBSD d'origine (en haut) et image après traitement (en bas).

2. Les joints de grains β peuvent alors être détectés par la différence de couleurs. Pour cela, les méthodes des gradients morphologiques développées par [Rivest *et al.*, 1996] peuvent être employées. Le gradient de Beucher est ainsi implémenté sous Matlab® pour permettre la détection des contours de chaque ex-grain β (Fig.4.4) ;

FIGURE 4.4 – Détection des contours des ex-grains β.

3. Les contours sont ensuite discrétisés, ce qui permet d'obtenir une suite de points décrivant un contour fermé ;

4. D'autres points sont ajoutés à l'intérieur de chaque ex-grain β. Plus le nombre de points sera grand, plus le maillage sera fin. Par ailleurs, pour que le maillage final soit uniforme, il est important que la distribution soit bien répartie et non pas totalement aléatoire. Pour cela, on est amené à utiliser des méthodes plus complexes, tel que l'algorithme "Hit and Run" développé par [Lantuejoul, 2002]. Une contrainte supplémentaire vient s'additionner à cet algorithme : pour éviter que des points se trouvent trop près de ceux des contours, une fonction distance est définie (Fig.4.5) ;

FIGURE 4.5 – Fonction distance définissant la zone de répulsion pour la distribution des points.

5. A partir du nuage de points généré, et de celui obtenu par discrétisation des contours, une triangulation de Delaunay contrainte est effectuée afin de relier tous les points tout en respectant les frontières ;

6. Les points et les segments sont enregistrés selon le formalisme du logiciel Zébulon, de manière à obtenir le maillage souhaité (Fig.4.6).

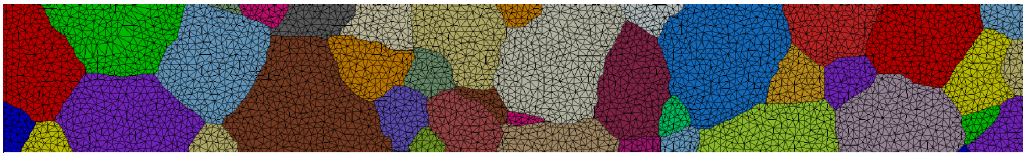


FIGURE 4.6 – Maillage 2D de la surface supérieure de l'éprouvette, obtenu à partir du scan EBSD.

L'éprouvette a été sollicitée en traction simple sur une micro-machine de traction INSTRON 1362, et l'évolution de la déformation a pu être suivie grâce au dépôt d'un mouchetis

sur la surface supérieure. Il s'agit d'une peinture contenant de fines particules de 7 μm de diamètre (Fig.4.7), dont le déplacement durant l'essai peut être évalué par corrélation d'images prises à intervalles réguliers par une caméra à capteur CCD très haute définition. Ce champ de déplacement est ensuite projeté sur un maillage carré 2D sous Abaqus®, ce qui permettra de calculer les champs de déformation correspondants.

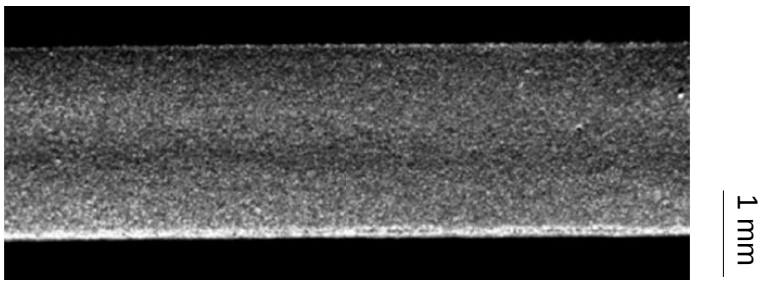


FIGURE 4.7 – Macrographie du mouchetis pendant l'essai de traction.

Le mouchetis est retiré après l'essai pour pouvoir réaliser les mesures au microscope optique interférométrique (MOI) des déplacements hors-plan provoqués par les hétérogénéités de déformation (Fig.4.8). Il est important de noter qu'à ce stade, la déformation est uniquement plastique, puisque la mesure est effectuée après décharge.

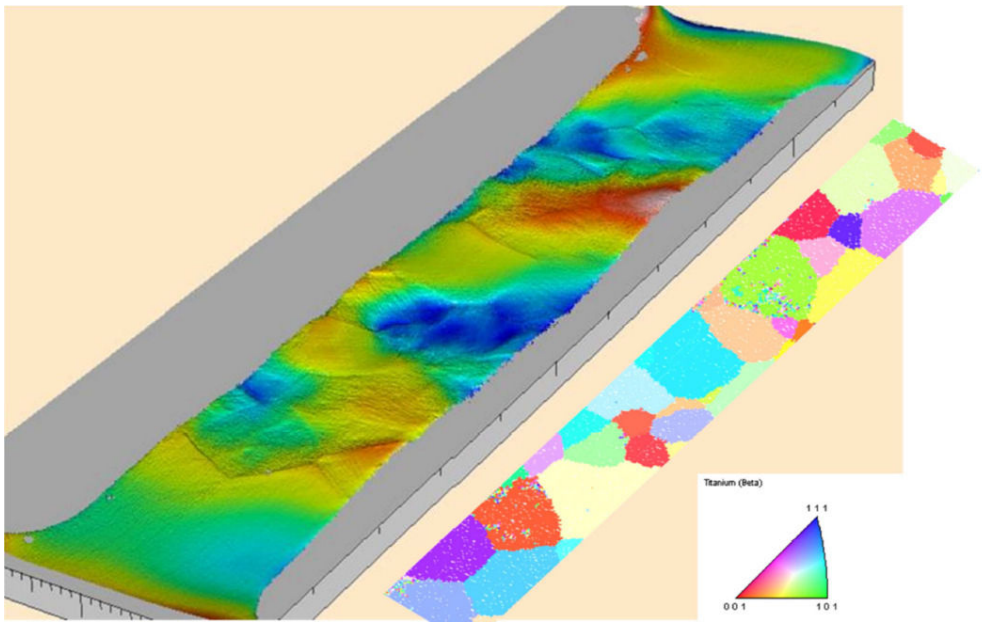


FIGURE 4.8 – Mesure du déplacement hors-plan au MOI [Duval, 2012].

Deux solutions sont proposées pour le maillage de l'éprouvette : la première consiste à extruder la face supérieure, puisque toutes les informations expérimentales mesurées se trouvent sur cette surface (Fig.4.9). Cette méthode reste assez grossière, et n'exploite pas les données de la surface inférieure. On propose donc une seconde approche, qui prend en compte les relevés expérimentaux sur chaque face, et qui fait l'hypothèse que seuls deux ex-grains β coexistent dans l'épaisseur, ce qui semble raisonnable puisque la taille des grains (300 μm - 1mm) est grande devant l'épaisseur (920 μm). Dans ce cas, on propose d'extruder chaque ex-grain β apparent en fonction de son diamètre en surface et de celui de l'ex-grain

β sous-jacent (Fig.4.10).

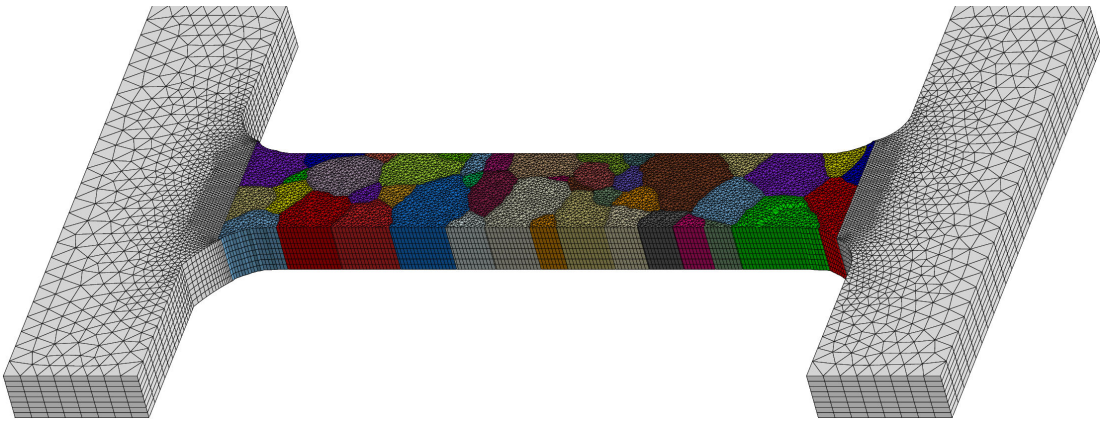


FIGURE 4.9 – Maillage 2D extrudé obtenu à partir du scan EBSD de la surface supérieure : 124 048 éléments prismatiques linéaires à base triangulaire (c3d6), 217 296 degrés de liberté.

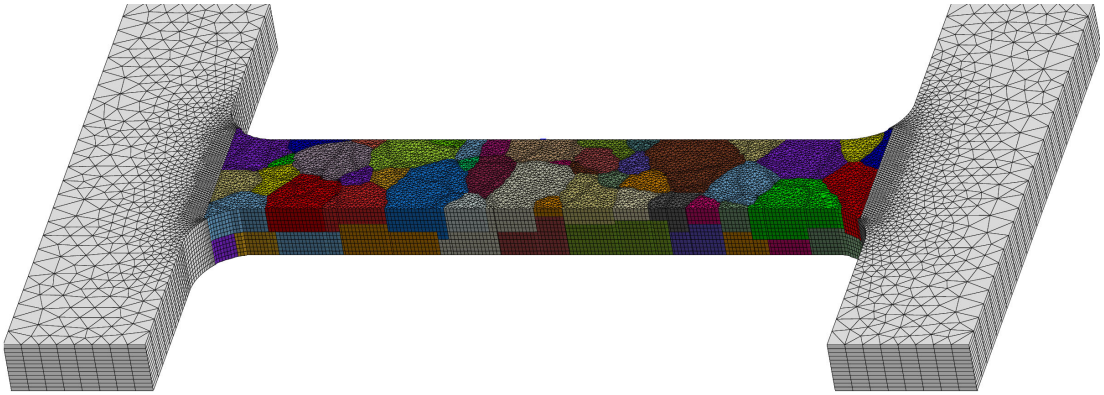


FIGURE 4.10 – Maillage 3D obtenu à partir du scan EBSD des deux surfaces : 194 304 éléments prismatiques linéaires à base triangulaire (c3d6), 327 327 degrés de liberté.

4.1.2 Homogénéisation des ex-grains β

Pour représenter le comportement de chaque grain β transformé dans le calcul EF effectué avec le logiciel Zset/Zebulon, on utilise un modèle à champs moyens couplé avec une loi de comportement en plasticité cristalline. La prise en compte de l'élasticité anisotrope locale pour cet essai est très importante car, comme on peut le voir sur la figure 1.32, les hétérogénéités de déformation sont très marquées sur l'éprouvette, et ce malgré le fait que la déformation totale reste limitée ($\sim$ 2.5%). On peut donc en déduire qu'une part importante des hétérogénéités est due à l'anisotropie de la déformation élastique.
Une solution serait donc d'utiliser le modèle des champs translatés présentés pour les alliages de titane β-métastable dans le chapitre précédent, en supprimant le dernier niveau de l'homogénéisation, c'est-à-dire l'étape où l'on fait la moyenne sur les ex-grains β afin de retrouver le comportement de l'agrégat polycristallin. Ce modèle présente cependant deux inconvénients majeurs lorsqu'il est utilisé dans un calcul de structure :

1. d'une part le temps de calcul devient très important : le modèle doit être affecté à chaque point de Gauss du maillage, en prenant en compte l'orientation cristallo-

graphique imposée. Les nombreuses variables en plasticité cristalline à intégrer et la nécessité de calculer les tenseurs de Green modifiés à chaque pas de temps conduisent à des durées de simulation de plusieurs jours, même en utilisant le parallélisme (multi-threading) ;

2. d'autre part, l'intégration numérique nécessaire pour incrémenter le tenseur de Green modifié basé sur l'opérateur sécant viscoplastique $\underset{\approx}{B}$ est délicate, car ce dernier est très anisotrope dans le cas où le HEM est composé d'un nombre restreint d'inclusions aux comportements très différents. Le fait de considérer toutes les inclusions en tant que sphères aide à la convergence, mais ce n'est pas toujours suffisant.

Pour ces raisons, il apparaît plus judicieux d'utiliser un modèle certes moins satisfaisant d'un point de vue théorique, mais beaucoup plus rapide et robuste d'un point de vue numérique. Le modèle ACAP, qui a été décrit et discuté dans la section précédente (3.3), sera le modèle utilisé pour la suite. On rappelle que ce modèle a donné des résultats assez similaires à celui des champs translatés pour des paramètres matériau équivalents (Fig.3.60).

Dans ce cadre, la méthode itérative présentée en (3.23) est reprise, et on suppose que le HEM n'est pas isotrope. En conséquence, le tenseur d'élasticité caractéristique de chaque ex-grain β est calculé dans une étape préliminaire grâce à l'équation proposée en (3.46), à la différence que l'on ne considère pas cette fois les 12 variants, mais seulement les 5 à 7 variants attribués aléatoirement au cas par cas. A partir des constantes d'élasticité de chaque ex-grain β qui seront évaluées (cf. équation 3.46), il est possible de calculer le tenseur d'Eshelby dans le contexte de l'inclusion sphérique (cf Fig.3.25).

Pour cette éprouvette à la géométrie particulière, l'effet de surface libre doit être pris en compte. Il est souvent admis que les surfaces permettent au matériau de faire disparaître un grand nombre de dislocations, ce qui a pour conséquence de réduire considérablement l'écrouissage des zones superficielles. Pour cette raison, des paramètres matériau différents de ceux proposés jusqu'à présent doivent être choisis. Pour les identifier, il faut effectuer plusieurs fois le calcul en essayant de reproduire de la manière la plus précise possible la courbe de chargement expérimentale (Fig.4.11). Les paramètres matériau sont présentés dans le tableau 4.1 : les constantes d'élasticité sont conservées (Tab.3.4), de même que les paramètres de viscosité n et K (Tab.3.6). On fait remarquer que le paramètre τ_c^s a dû être considérablement rehaussé afin d'éviter une trop grande déformation.

	n	K (MPa.s$^{1/n}$)	τ_c^s (MPa)	c (MPa)
Basal	30	240	290	10
Prismatique	30	240	305	10
Pyr. $<a>$	30	240	360	10
Pyr. $<c+a>$	30	240	430	30
{110}	20	300	200	10
{112}	20	300	200	10
{123}	20	300	195	10

TABLE 4.1 – Jeu de paramètres matériau pour l'éprouvette plate en Ti17 Snecma. Le modèle utilisé est une adaptation du schéma auto-cohérent de Hill, couplée avec un opérateur tangent élasto-plastique.

Les courbes présentées dans la figure ci-dessous montrent plusieurs paliers de contrainte, qui sont dus au fluage de l'éprouvette lorsque l'essai est interrompu pour pouvoir photographier le mouchetis. Pour cette raison, il est nécessaire de piloter la simulation en force et non en déplacement.

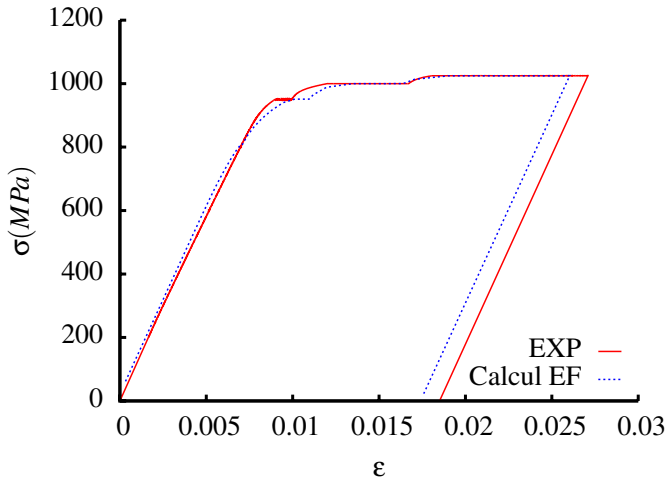


FIGURE 4.11 – Courbes contrainte - déformation obtenues pour l'essai de micro-traction expérimental et celui simulé.

Une identification précise des paramètres matériau n'est cependant pas suffisante si l'on veut reproduire correctement les champs de déformation et de déplacement hors-plan. Comme cela a déjà été mentionné, le nombre et la fraction volumique des variants α dans chaque ex-grain β sont déterminés aléatoirement. Afin d'être certain de prendre les variants qui sont réellement présents dans l'éprouvette, on peut envisager de considérer les douze configurations possibles dans chaque ex-grain β. Cette solution n'est cependant pas viable puisqu'en prenant tous les variants α, on réduit le degré d'anisotropie de chaque grain β transformé, et on restreint alors considérablement les hétérogénéités de déformation à l'échelle macroscopique.

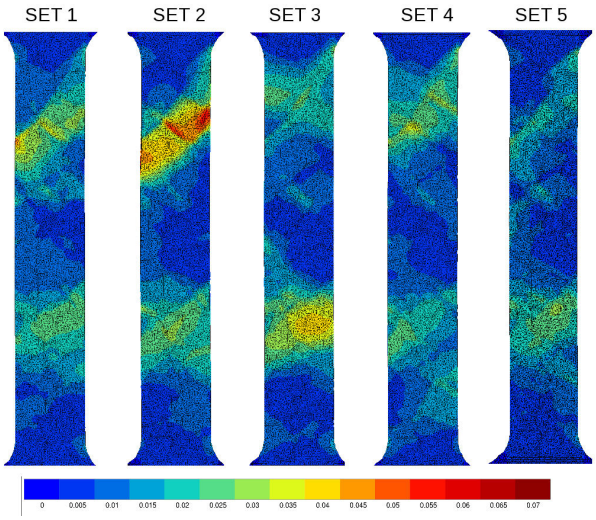


FIGURE 4.12 – Champs de déformation longitudinale simulés en fin de traction pour 5 tirages aléatoires différents de variants α. On note que les différences sont plus d'ordre quantitatif que qualitatif.

En conséquence, on n'a d'autre choix que de tester un grand nombre de combinaisons, et d'étudier le résultat qui nous semblera le plus probant (Fig.4.12). C'est ce dernier qui sera présenté dans la section suivante.

4.2 Résultats du calcul EF

4.2.1 Champs de déformation

La comparaison des champs de déformation simulés et expérimentaux se fait avant la décharge. Etant donné que la fenêtre d'étude pour la corrélation d'images est restreinte, la comparaison porte uniquement sur cette dernière. Pour aider à la confrontation, l'image EBSD de la surface supérieure est rappelée sur chaque figure. Les contours géométriques des grains β transformé sont également reportés sur les champs de déformation. Les résultats présentés sont issus du calcul effectué sur l'éprouvette modélisée avec deux grains dans l'épaisseur. La première comparaison porte sur les champs de déformation obtenus dans la direction de sollicitation (Fig.4.13).

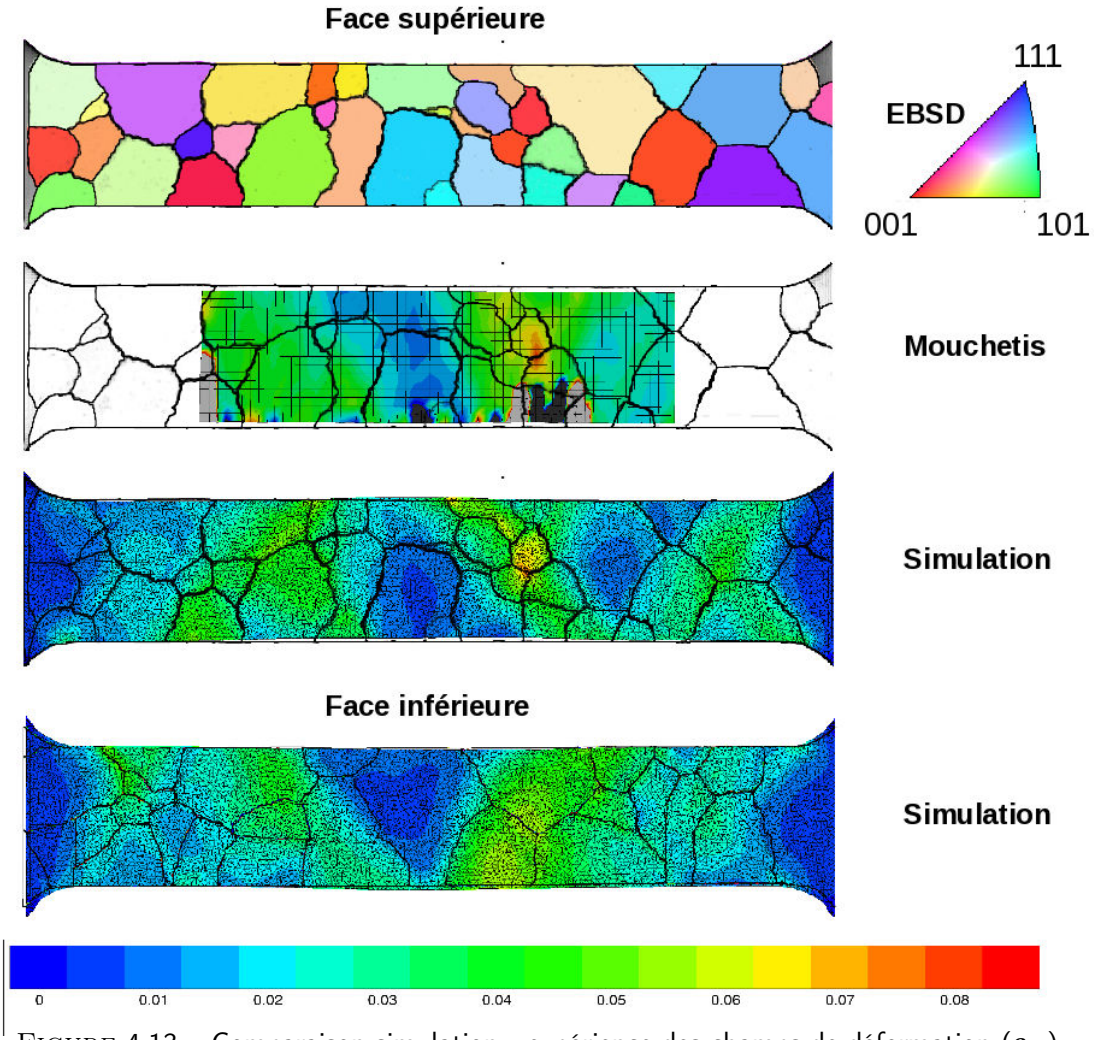


FIGURE 4.13 – Comparaison simulation - expérience des champs de déformation (ε_{11}).

On peut observer une bonne corrélation entre les résultats expérimentaux et simulés. Les déformations sont reproduites à la fois de manière qualitative et quantitative, comme le

prouve également le champ d'erreur proposé dans la figure 4.14. Pour construire ce dernier, les valeurs de ε_{11} sont extraites pour tous les nœuds du maillage 2D ayant servi au calcul du champ de déformation expérimental, et pour tous ceux de la surface de notre éprouvette EF. Les deux maillages étant différents, l'écart entre les champs de déformation est calculé pour chaque nœud du maillage le plus grossier, en l'occurrence celui servant à l'analyse expérimentale. La valeur à chacun de ses nœuds est alors comparée à celle du nœud le plus proche dans le maillage de l'éprouvette EF. Le champ d'erreur nous montre que l'erreur faite avec la simulation reste comprise entre 0 à 50%, si on néglige les résultats aux bords, qui sont moins précis dans la mesure expérimentale.

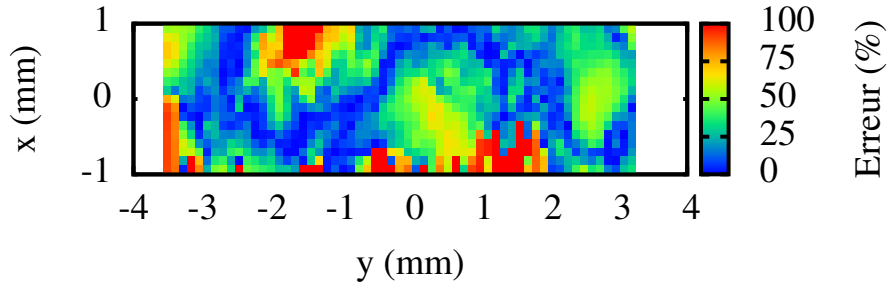


FIGURE 4.14 – Champ d'erreur entre les déformations expérimentales et simulées (ε_{11}).

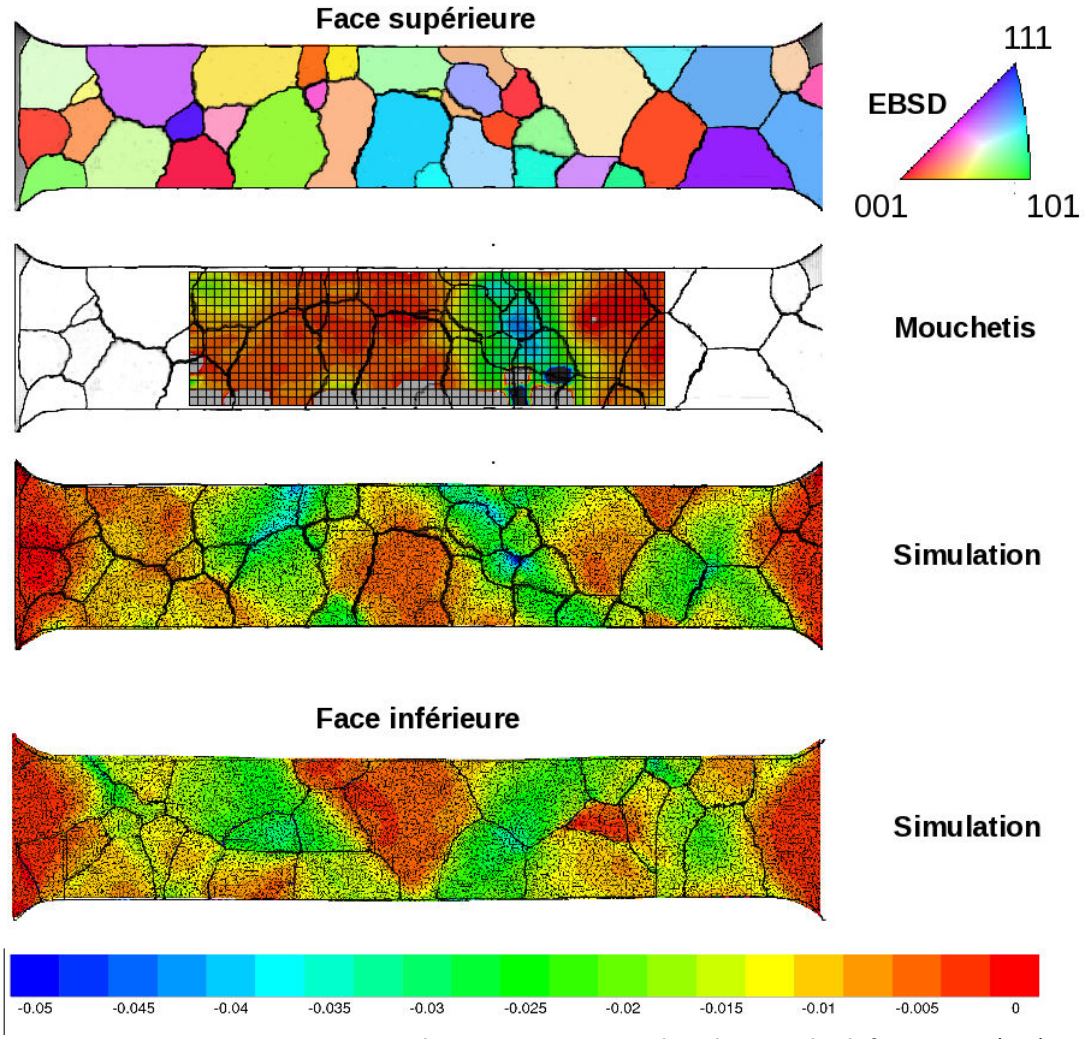


FIGURE 4.15 – Comparaison simulation - expérience des champs de déformation (ε_{22}).

Des comparaisons ont également été faites pour les déformations transverses (Fig.4.15), et celles en cisaillement dans le plan (Fig.4.16). Les différences apparaissent comme plus marquées, mais les résultats restent tout de même très satisfaisants.

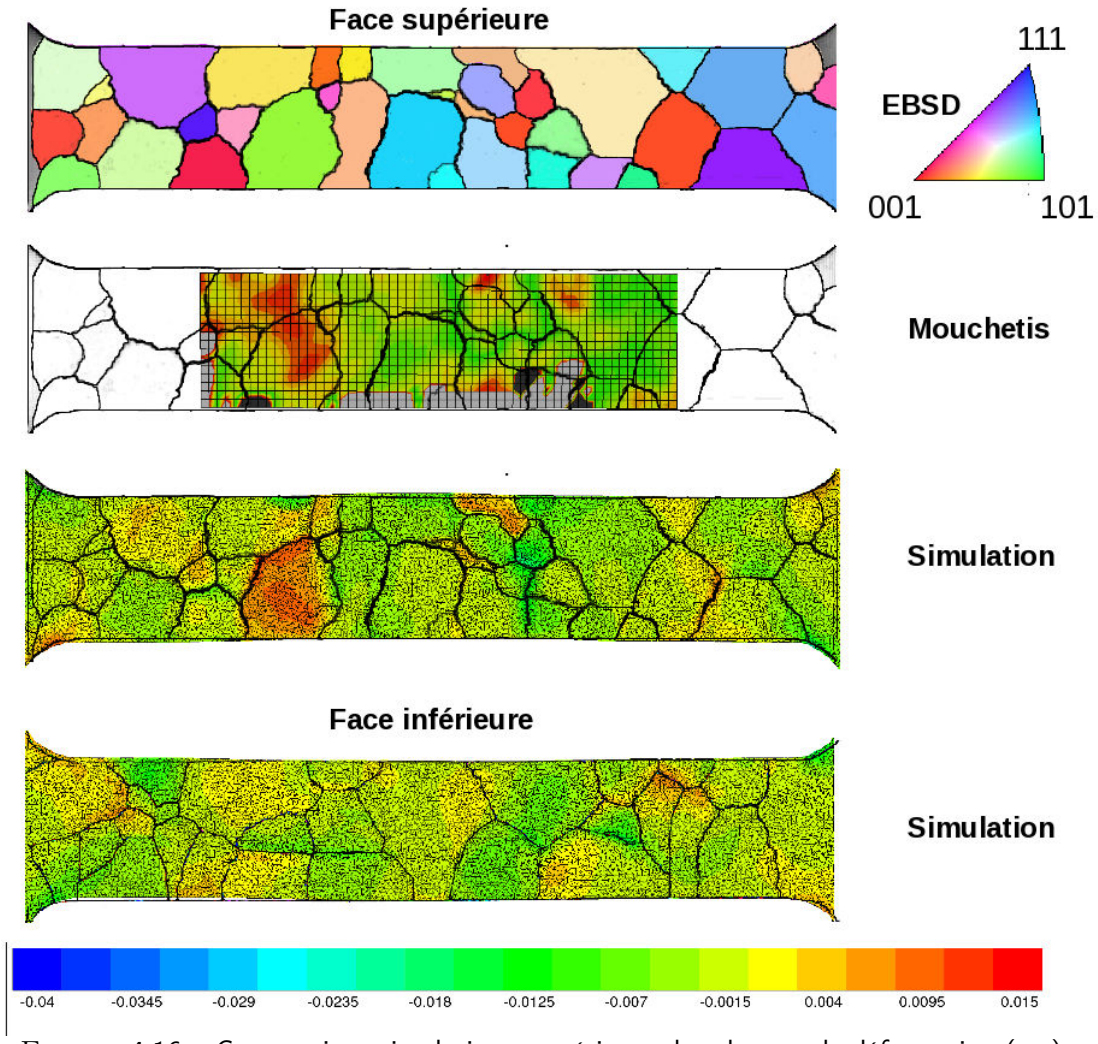


FIGURE 4.16 – Comparaison simulation - expérience des champs de déformation (ε_{12}).

Dans la section précédente, on soulignait l'importance d'utiliser des modèles prenant en compte les hétérogénéités élastiques. La figure 4.17 montre le champ de déformation ε_{11} obtenu avec le modèle de la règle en β dans les mêmes conditions que précédemment. On peut constater que la déformation reste relativement homogène dans toute la partie utile, à l'exception d'une zone singulière où se concentre l'ensemble des déformations, ce qui démontre le rôle primordial de l'anisotropie élastique locale pour ce genre de calcul EF.

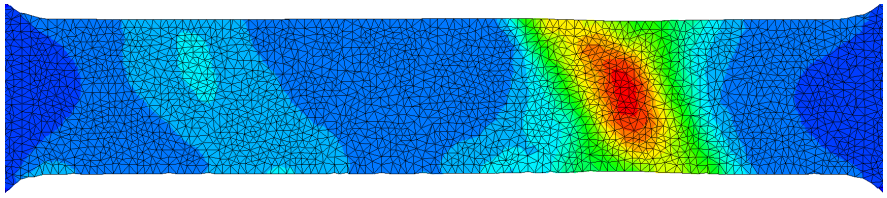


FIGURE 4.17 – Champ de déformation simulé avant décharge dans une hypothèse d'élasticité isotrope (règle en β).

4.2.2 Champ de déplacement hors-plan

Le relief de la surface supérieure, généré par les incompatibilités de déformation entre ex-grains β, a fait également l'objet d'une comparaison simulation - expérience. Le champ de déplacement hors-plan (U_3) obtenu avec le calcul numérique est confronté au relief mesuré par microscope optique interférométrique (MOI). Il apparaît que la simulation ne permet pas de représenter correctement les déplacements hors-plan (Fig.4.18), malgré le fait que les champs de déformation soient bien reproduits. On constate que l'éprouvette simulée a subi un gauchissement très marqué, et que cet effet est dû à la déformation trop étendue de certains ex-grains β sous-jacents (Fig.4.19). Si ces grains β transformé n'ont apparemment pas eu beaucoup d'influence dans le plan, ils ont en revanche beaucoup plus d'impact dans l'épaisseur.

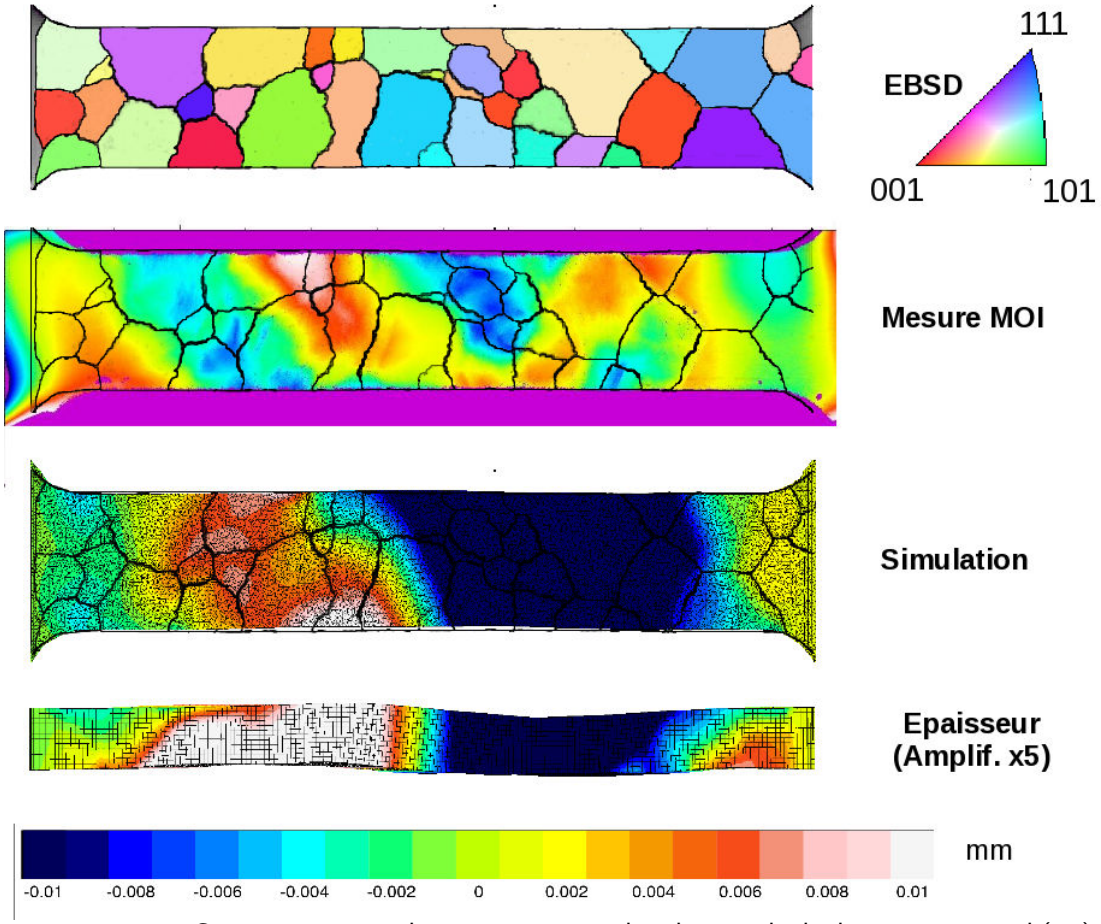


FIGURE 4.18 – Comparaison simulation-expérience des champs de déplacement normal (U_3).

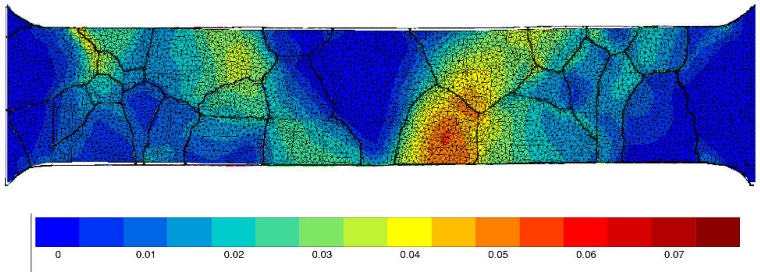


FIGURE 4.19 – Champ de déformation plastique simulé après déchargement pour la surface inférieure (ε_{11}^p).

Si la déformation est trop importante dans certains grains β transformé de la couche inférieure, c'est certainement que les jeux de variants α qui leur ont été attribués ne sont pas les bons. Une solution pour obtenir un champ de déplacement hors-plan plus en accord avec l'expérience pourrait consister à tester de nouvelles combinaisons de variants pour la couche inférieure d'ex-grains β. Mais une solution plus simple consiste à supposer que ces ex-grains β ne se déforment pas suffisamment pour avoir une réelle influence sur les mesures de la surface supérieure. En conséquence, l'utilisation de l'éprouvette EF en 2D extrudée est justifiée. La simulation de l'essai sur cette dernière est donc effectuée en conservant les mêmes jeux de variants α pour les ex-grains β de la surface supérieure. Le résultat, à défaut d'être quantitativement très proche de celui obtenu expérimentalement (Fig.4.21), se montre qualitativement très semblable.

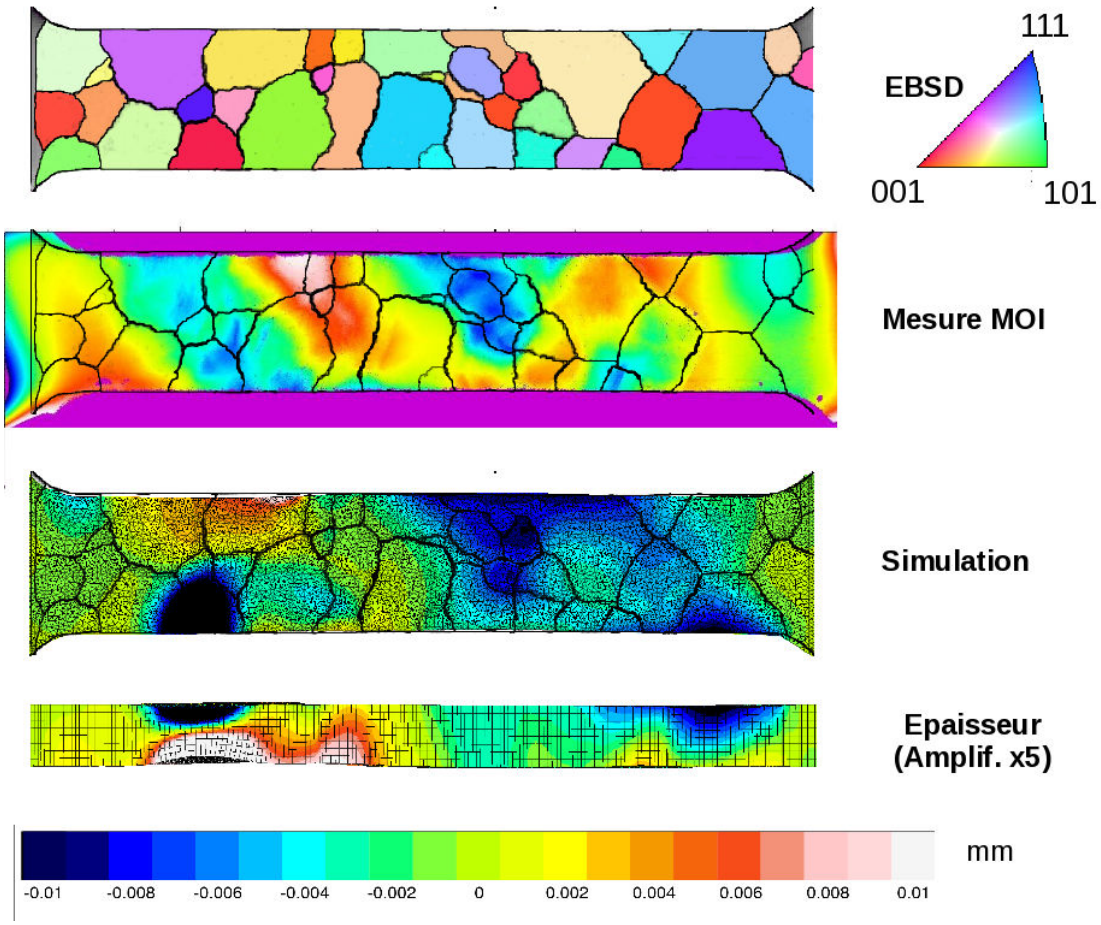


FIGURE 4.20 – Comparaison simulation-expérience des champs de déplacement normal (U_3).

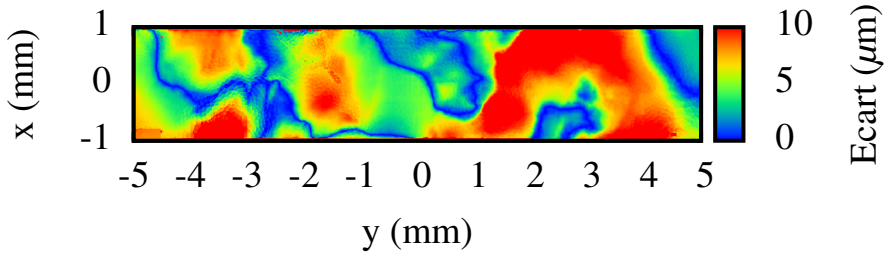


FIGURE 4.21 – Champ d'erreur entre les déplacements normaux simulés et expérimentaux.

4.3 Discussion

La comparaison des champs nous a permis de valider notre modèle et d'identifier les paramètres matériau liés à cette géométrie d'éprouvette particulière. On va maintenant chercher à analyser plus en détails les résultats de la simulation, en se basant sur les réflexions des auteurs de l'expérience [Duval, 2012]. Pour cela, l'étude portera essentiellement sur les ex-grains β de la surface supérieure. On veut donc s'assurer dans un premier temps que les ex-grains β sous-jacents n'ont pas une trop grande influence sur les champs de déformation dans le plan. Il s'avère que la simulation avec le maillage 2D extrudée, dont les champs de déplacement hors-plan avaient été montrés dans la section précédente, donne un champ de déformation ε_{11} assez semblable à celui qui est obtenu avec le maillage de l'éprouvette contenant deux couches d'ex-grains β (Fig.4.9).

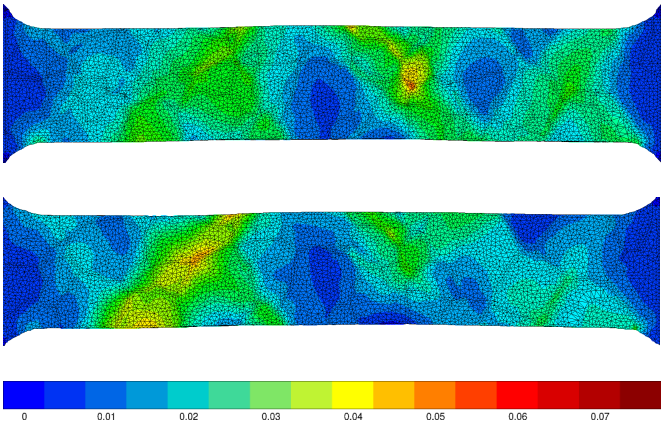


FIGURE 4.22 – Comparaison entre le champ simulé en déformation (ε_{11}) pour les deux maillages de l'étude (cf. Fig.4.9 et Fig.4.10).

Si l'on revient aux résultats de la figure 4.13, on peut constater qu'il existe des correspondances entre les orientations cristallographiques des matrices β et les hétérogénéités de déformation. Peu d'effet de contraintes intergranulaires sont visibles : en première approximation, on peut dire que chaque ex-grain β se comporte comme un monocristal. Dans notre analyse, trois zones en particulier ont attiré notre attention (Fig.4.23) :

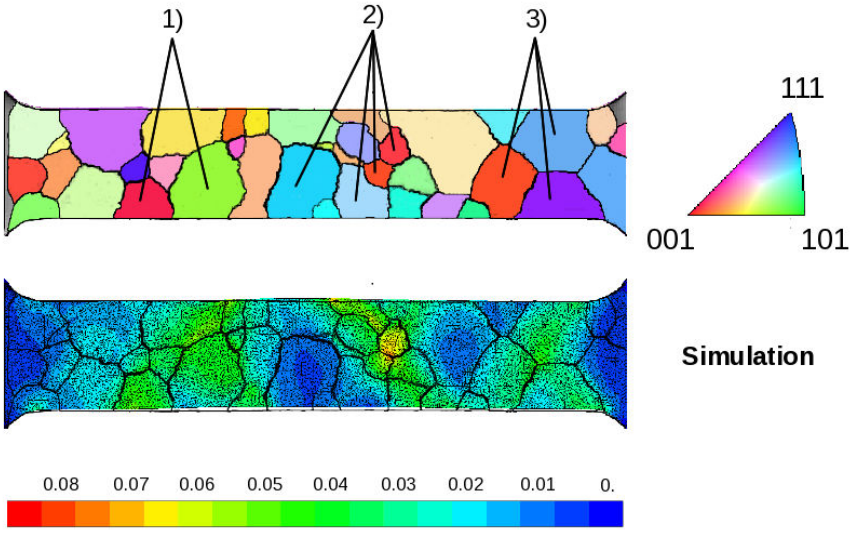


FIGURE 4.23 – Champ de déformation suivant la direction de sollicitation et correspondance avec la carte EBSD des orientations cristallographiques de la phase β.

• Les ex-grains β de couleur rouge, c'est-à-dire ceux dont la phase β est orientée $< 100 >_\beta$ selon à l'axe de traction, sont ceux qui subissent le plus de déformation (zone 1,2 et 3). Les orientations $< 110 >_\beta$, symbolisées par la couleur verte, sont également des lieux de déformation (zone 1). Quant aux ex-grains β représentés par la couleur bleue (orientation $< 111 >_\beta$), ils s'avèrent être les plus résistants à la déformation (zone 2).

• Cette tendance n'est néanmoins pas observée partout, la zone 3 donne par exemple une situation où les ex-grains β orientés $< 111 >_\beta$ se déforment autant que ceux orientés $< 100 >_\beta$.

• Ces résultats sont en accord avec l'analyse présentée dans le chapitre 3 (Fig.3.28 et Fig.3.29). On rappelle que les essais de traction simulés sur les ex-grains β orientés $< 111 >_\beta$, $< 110 >_\beta$ et $< 100 >_\beta$ montraient que cette dernière orientation était la plus à même de se déformer, et ce quels que soient les variants α en présence.

Dans son analyse expérimentale, [Duval, 2012] explique ces relations de la manière suivante :

• Dans les ex-grains β où la matrice est orientée $< 100 >_\beta$, cette dernière va se déformer facilement en traction puisque son module d'Young sera faible. Au sein des ex-grains β concernés, la phase α, qui est plus résistante à la déformation, va devoir s'accommoder de cette déformation matricielle. Cette situation va générer des contraintes dans les précipités α, ce qui pourra provoquer de manière précoce leur déformation.

• A l'opposé, les ex-grains β pour lesquels la matrice est orientée $< 111 >_\beta$ auront une phase β plus difficile à déformer, ce qui donnera un ensemble plus homogène en contrainte et plus résistant à la déformation.

Les résultats de la simulation peuvent permettre d'aller plus loin dans l'analyse. Il est par exemple possible de connaître les contributions de chaque famille de systèmes de glissement, au travers des variables de déformation plastique cumulée (Fig.4.24). Ces informations peuvent ensuite être confrontées aux plus grands facteurs de Schmid de chaque famille (Fig.4.25 – tous les variants possibles sont considérés), afin de savoir quels sont les autres facteurs d'influence sur la plasticité. On note qu'il existe une grande dispersion des facteurs de Schmid pour les familles basale et pyramidale : ceci est dû au fait que ces familles ne possèdent que trois systèmes pour le mouvement des dislocations, il est donc plus difficile de trouver un système bien orienté pour la déformation plastique.

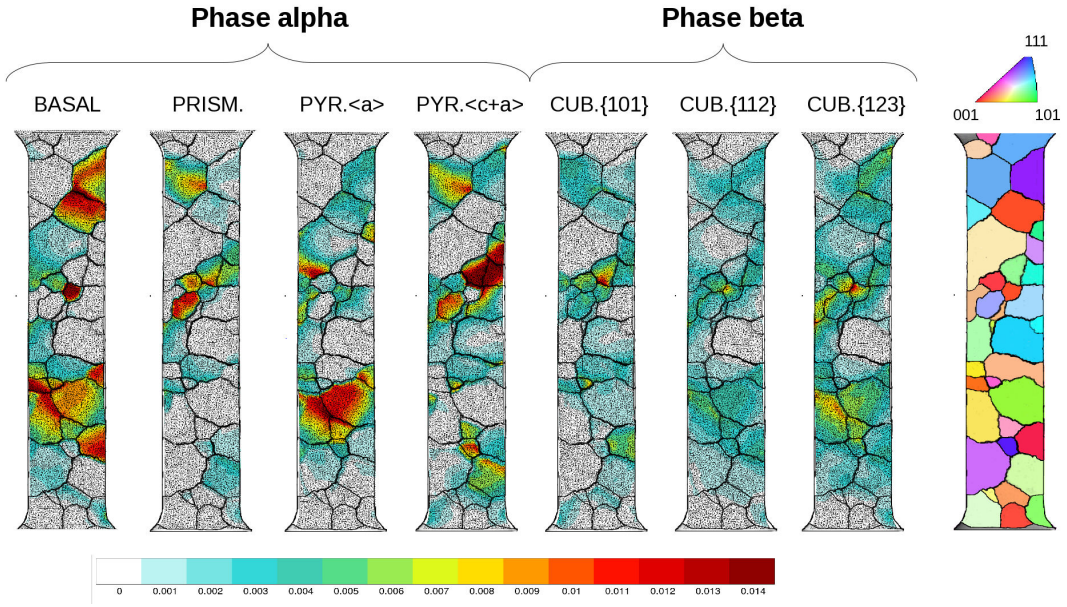


FIGURE 4.24 – Contribution de chaque famille de systèmes de glissement (déformation plastique cumulée).

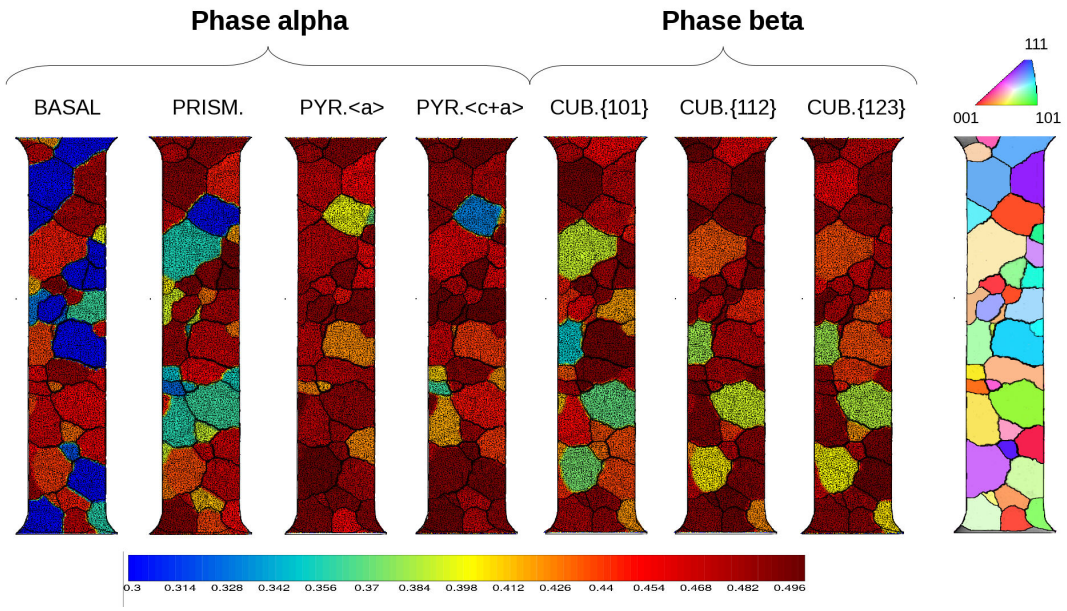


FIGURE 4.25 – Plus grand facteur de Schmid pour chaque famille de systèmes de glissement.

Concernant les familles de systèmes de glissement pour la phase β, on s'aperçoit que les ex-grains β qui ont une orientation matricielle proche de $<100>_\beta$ possèdent de grands facteurs de Schmid. C'est d'ailleurs ceux qui sont le plus déformés pour la phase β. Les directions de type $<110>_\beta$ sont défavorables quel que soit le plan de glissement considéré, c'est également le cas des directions $<111>_\beta$ pour les familles de type $\{112\}$ et $\{123\}$. Pour la famille $\{110\}$, la situation est différente, les plus grands facteurs de Schmid sont obtenus pour les orientations proches de $<111>_\beta$. Cela ne signifie pas pour autant que ces ex-grains β vont voir leur phase β se déformer. Par exemple, le grain bleu au centre de la partie utile est favorable à la déformation de type $\{110\}$, mais reste très peu déformé par ces systèmes de glissement. Ceci est certainement dû au fait que le module d'Young de la matrice β est très élevé par rapport aux autres ex-grains β voisins.

Pour la famille prismatique et la famille pyramidale $<c+a>$ de la phase α, les prédictions données par les facteurs de Schmid s'avèrent être constamment vérifiées : les systèmes de glissement de ces familles vont générer de la plasticité principalement pour les ex-grains β ayant des facteurs de Schmid élevés.

Pour la famille basale et la famille pyramidale $<a>$, la situation est relativement différente. Les données sur ces deux familles sont rassemblées pour plus de visibilité sur les figures 4.26 et 4.27.

Dans le cas de la famille basale, on observe que les grains β transformé dont l'orientation de la matrice est $<100>_\beta$ ont le facteur de Schmid le plus élevé. A l'opposé, les ex-grains β orientés $<111>_\beta$ ont des facteurs de Schmid très faibles. Cette tendance est à relier implicitement aux relations de Burgers (Fig.1.2). En conséquence, on observe que les grains β transformé les plus déformés par les systèmes basaux sont ceux dont l'orientation est proche de $<100>_\beta$, et que ceux orientés suivant $<111>_\beta$ ne sont pas concernés par ce mode de déformation.

Pour la famille pyramidale $<a>$, il semble au regard des facteurs de Schmid que les orientations de type $<110>_\beta$ sont les plus favorables à la déformation, alors que les orientations $<100>_\beta$ sont les plus défavorables. Pourtant, il apparaît que certains ex-grains β orientés $<100>_\beta$ se déforment plastiquement avec les systèmes de glissement pyramidaux $<a>$. Dans le même temps, les ex-grains β orientés $<111>_\beta$, qui ont des facteurs de Schmid plus élevés que ceux du $<100>_\beta$ ne se déforment pas avec cette famille de systèmes de glissement. La règle selon laquelle la déformation est dictée par les plus grands facteurs de Schmid ne fonctionne pas dans ce cas.
L'explication la plus plausible peut être reliée aux conclusions de [Duval, 2012] : c'est la déformation élastique importante de la matrice des ex-grains β orientés $<100>_\beta$ qui, en imposant des contraintes importantes dans les variants α, provoque de la plasticité de type pyramidale $<a>$. A l'opposé, dans les ex-grains β orientés $<111>_\beta$, le comportement rigide de la matrice rend la déformation de la phase α moins nécessaire, ce qui peut expliquer l'absence de déformation de type pyramidale $<a>$ dans ces grains β transformé, même si les facteurs de Schmid sont élevés.

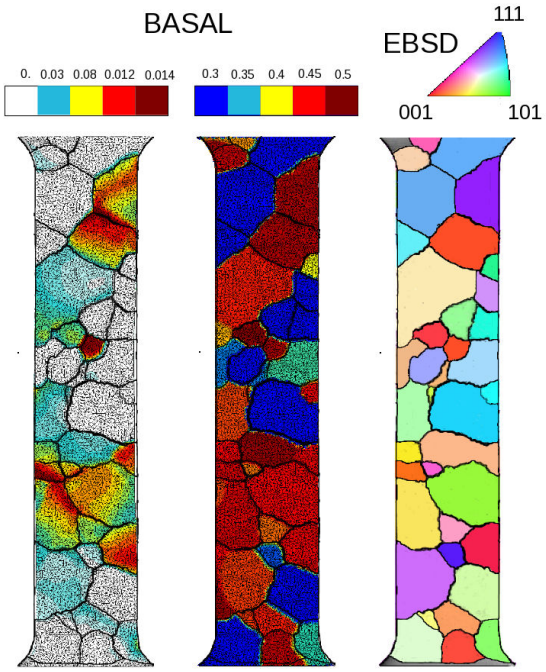


FIGURE 4.26 – Comparaison des différents champs étudiés pour la famille basale. De gauche à droite : glissement cumulé, plus grand facteur de Schmid et orientation cristallographique de la phase β.

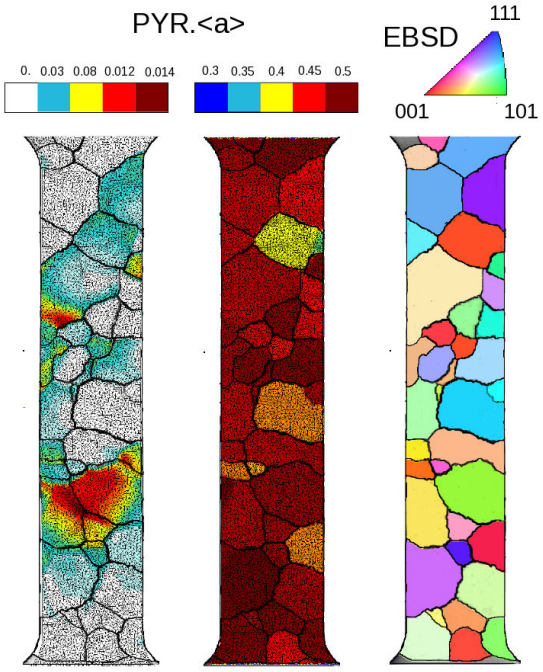


FIGURE 4.27 – Comparaison des différents champs étudiés pour la famille pyramidale $< a >$. De gauche à droite : glissement cumulé, plus grand facteur de Schmid et orientation cristallographique de la phase β.

4.4 Conclusions partielles

Dans ce chapitre, on a voulu mettre en avant le rôle des ex-grains β dans la déformation des alliages de titane β-métastable. Pour cela, on a cherché à reproduire un essai de micro-traction sur une éprouvette plate possédant une épaisseur inférieure au millimètre. Les orientations cristallographiques de la phase β et les contours des ex-grains β ont été fidèlement respectés. Pour représenter le comportement de chaque ex-grain β, on a homogénéisé les comportements particuliers de la matrice β et des 5 à 7 variants α considérés. Le modèle ACAP qui a été utilisé est basé sur le schéma auto-cohérent de Hill et sur l'introduction d'un opérateur tangent local élasto-plastique, associé à un comportement local élasto-viscoplastique. Ce modèle a l'avantage d'être rapide et robuste quand il est utilisé dans des calculs de structure.

Les différentes comparaisons menées entre simulation et expérience dans la section 4.2 ont permis de valider le modèle et les paramètres matériau associés, ainsi que le choix des variants α pour chaque ex-grain β. A partir de ce constat, on a pu aller plus loin dans notre analyse des mécanismes de déformation à cette échelle. La principale conclusion est la suivante : les ex-grains β dont la matrice β possède une orientation proche de $< 100 >_\beta$ sont ceux qui se déforment le plus, tandis que ceux dont la matrice est orientée $< 111 >_\beta$ sont très résistants à la déformation. Cette tendance est due principalement à deux raisons :

• d'une part l'élasticité de la phase β qui est "molle" dans la direction $< 100 >_\beta$ et "dure" dans la direction $< 111 >_\beta$ va avoir une influence sur l'amorçage de la plasticité, que ce soit pour les systèmes de glissement de la phase β, mais également, de façon indirecte, pour ceux de la phase α.

• d'autre part, les relations de Burgers font que lorsque la matrice β est orientée $< 100 >_\beta$, les variants α sont orientés de telle sorte que les systèmes basaux de chacun d'entre eux possèdent des facteurs de Schmid élevés. A l'opposé, des facteurs de Schmid faibles sont obtenus lorsque la matrice est orientée $< 111 >_\beta$. Quand on sait que la déformation basale contribue pour environ 60% dans les 2% de la déformation en traction (Fig.3.19), on comprend que ce phénomène a son importance.

L'étude des ex-grains β permet donc d'obtenir des informations pertinentes pour prédire la déformation des alliages de titane β-métastable. On souligne également le rôle particulier de la phase β, qui ne participe certes pas autant à la déformation plastique que la phase α, mais qui conserve une grande influence au travers de son comportement élastique anisotrope.

Conclusion générale et perspectives

Au cours de cette étude, nous avons cherché à représenter d'un point de vue numérique les microstructures des alliages de titane β-métastable et leur comportement mécanique à température ambiante. Pour cela, on s'est tout d'abord intéressé, à l'échelle microscopique, aux comportements locaux des phases en présence, ainsi qu'aux relations cristallographiques et morphologiques qui les unissent. Pour plus de simplicité, les hétérogénéités locales ont été classées en plusieurs catégories. Dans notre approche, les constituants représentatifs des alliages de titane β-métastable sont les matrices β et les variants α de chaque ex-grain β. Chaque variant α représente l'ensemble des précipités α de même orientation cristallographique. Les constantes d'élasticité de la phase α isotrope transverse et de la phase β cubique ont pu être évaluées. Des lois de comportement, fondées sur des critères en plasticité cristalline intégrant des variables d'écrouissage cinématique et isotrope, ont été attribuées à chaque système de glissement afin de décrire l'écoulement plastique local des variants α et des matrices β. Les relations cristallographiques et morphologiques sont respectées (orientation cristallographique des ex-grains β, relations de Burgers, orientation morphologique des précipités α) par l'intermédiaire d'une série de rotations qui permet aux variables locales d'être exprimées dans leur repère spécifique.

La transition entre l'échelle macroscopique, dont les caractéristiques mécaniques sont connues grâce aux différents essais expérimentaux menés dans le projet PROMITI, et l'échelle microscopique, pour laquelle tout est à déterminer, se fait au travers de modèles à champs moyens. Il s'agit de méthodes d'homogénéisation des comportements non-linéaires locaux, qui sont plus ou moins complexes selon les simplifications et les hypothèses adoptées. Chaque modèle à champs moyens se caractérise par une loi de concentration qui permet de déterminer les contraintes locales à partir de celles imposées à l'échelle macroscopique. La déformation locale se calcule ensuite suivant la loi de comportement imposée, à partir de la contrainte locale. Puis, on peut remonter à la déformation effective du matériau par un calcul de moyenne. Pour faire notre choix parmi les différents modèles de la littérature, une comparaison a été proposée dans le cadre plus classique des polycristaux équiaxes. Deux d'entre eux se sont distingués : le premier est basé sur une loi de concentration de type KBW, qui est modifiée par l'introduction d'une règle en β ; le second repose sur la technique des champs translatés et sur le traitement dissocié de l'élasticité et de la viscoplasticité. Les deux modèles s'avèrent être à même de décrire les hétérogénéités viscoplastiques pour tous types d'essais mécaniques, mais seul le second donne la possibilité de représenter également les hétérogénéités élastiques.

Il a aussi été question d'employer le schéma auto-cohérent de Hill dans un cadre élasto-viscoplastique. Il est apparu que dans le cas où l'écrouissage est de type cinématique linéaire,

son utilisation pouvait être rendue possible en couplant à l'échelle locale une loi de comportement élasto-viscoplastique avec un opérateur tangent élasto-plastique.

Les modèles de la règle en β et des champs translatés ont ensuite été adaptés aux microstructures des alliages de titane β-métastable. Dans cette optique, plusieurs morphologies d'inclusion ont été introduites dans le modèle des champs translatés. Pour s'assurer de l'intégrité du modèle, on a vérifié que l'écart à l'auto-cohérence restait faible. Une stratégie d'identification a été mise en place afin de déterminer de la manière la plus rigoureuse possible les paramètres matériau des deux modèles. Des essais de traction uniaxiale et de fatigue LCF sur du Ti17 Snecma et du Ti5553 MBD ont été mis à profit dans ce but. Les analyses *in-situ* de [Duval, 2012] ont également servi à l'identification : la déformation basale a ainsi été mise en avant, tandis que les familles prismatique et pyramidale sont restées minoritaires.

Après s'être focalisé sur des microstructures spécifiques, on a cherché à relier les paramètres matériau aux différentes microstructures qui peuvent exister pour le Ti17 et le Ti5553. A partir des fractions et des épaisseurs apparentes des populations de précipités α, on a supposé qu'il était possible d'exprimer le confinement de la plasticité au sein des phases. On peut alors relier ces caractéristiques microstructurales aux propriétés mécaniques macroscopiques, en construisant de manière empirique des fonctions polynomiales. Les constantes de ces fonctions sont évaluées en se servant des essais de traction effectués sur les nombreuses microstructures modèles conçues pour le projet PROMITI. On les a ensuite intégrées dans le modèle des champs translatés. Pour plus de simplicité, les critères en plasticité cristalline sont remplacés par des critères de type von Mises. De bonnes prédictions ont pu être obtenues pour une grande variété de microstructures.
Une seconde version a également été développée afin de simuler le comportement en traction des alliages texturés. Dans ce modèle, des critères de Hill sont attribués à des ex-grains β virtuels, incluant les 12 variants α, qui sont alors les éléments représentatifs de l'hétérogénéité élasto-viscoplastique dans le modèle des champs translatés. Des résultats prometteurs ont pu être obtenus lorsque le modèle a été comparé au modèle de plasticité cristalline pour simuler le comportement en traction uniaxiale d'agrégats texturés.

Afin de comprendre la relation entre les ex-grains β et les hétérogénéités de déformation à l'échelle macroscopique, un essai de micro-traction sur une éprouvette plate d'une épaisseur inférieure au millimètre a été effectuée par [Duval, 2012]. Cet essai a pu être reproduit en respectant le contour et l'orientation cristallographique réels de chaque ex-grain β pour les deux faces. Ces informations sont issues des cartographies réalisées EBSD-MEB de la partie utile. Le comportement biphasé de chaque ex-grain β est simulé en chaque point de Gauss par le modèle adapté du schéma auto-cohérent de Hill, et qui a été sujet à discussion dans le chapitre 3. Le modèle permet de prendre en compte l'élasticité locale, ce qui se révèle très important pour la réussite de la simulation, et il s'est montré capable de rivaliser avec le modèle des champs translatés pour certaines lois de comportement élasto-viscoplastique. Par ailleurs, par rapport à ce dernier, il s'avère plus robuste et plus rapide dans les calculs de structure EF.
Plusieurs simulations ont été nécessaires pour trouver les jeux de variants menant à des champs de déformation et de déplacement hors-plan proches de ceux mesurés expérimentalement à l'aide d'un mouchetis et d'un microscope optique interférométrique. L'analyse des résultats numériques et expérimentaux a montré que l'échelle des ex-grains β était pertinente pour étudier la déformation. Les orientations cristallographiques de la phase β se révèlent être de bons indicateurs pour savoir si l'ex-grain β sera résistant ou non à la dé-

formation. Cette tendance est due d'une part à l'anisotropie élastique de la phase β, qui conditionne les états de contrainte dans l'ex-grain β, et d'autre part aux relations de Burgers qui peuvent favoriser ou non la déformation basale. On rappelle que cette dernière est la principale contribution à la déformation plastique.
Dans le cadre industriel, ces informations locales peuvent aider à éviter certaines textures, et permettre de mettre en évidence, du point de vue microstructural, des zones à risques dans les pièces d'épaisseur fine.

Dans cette thèse, nous avons mis en place de nombreuses solutions numériques pour l'estimation des propriétés mécaniques de différentes microstructures de Ti17 et de Ti5553. Les perspectives restent cependant nombreuses. Concernant les modèles développés en plasticité cristalline, et identifiés pour le Ti17 Snecma et le Ti5553 MBD, il reste à trouver une loi de comportement donnant la possibilité de passer du comportement en traction, conditionné par la pré-déformation produite au cours de la mise en forme billette, au comportement en fatigue, où le chargement cyclique a estompé cette influence.
On peut également envisager de faire des comparaisons phase par phase avec des calculs éléments finis afin de s'assurer de la validité de nos prédictions à cette échelle. Une autre amélioration viserait à étendre les modèles au formalisme des grandes déformations.

Pour les modèles basés sur les relations propriétés mécaniques – microstructure, une étude plus approfondie est nécessaire. Les essais de traction sur les microstructures du projet PROMITI ont servi à construire les formulations analytiques et à identifier les constantes associées. Il faut maintenant évaluer la précision du modèle pour d'autres microstructures, et notamment celles qui présentent une texture. Il serait également valorisant de rendre ces modèles opérationnels dans un cadre industriel.
Enfin, il serait intéressant d'étudier par la même approche l'influence de la microstructure sur d'autres propriétés mécaniques, telles que la ténacité ou bien le nombre de cycles à rupture.

La simulation de la micro-traction pourrait également être accomplie avec le modèle des champs translatés, de manière à avoir un élément de comparaison supplémentaire.

Il est important pour les partenaires industriels d'avoir maintenant une meilleure connaissance des processus d'endommagement. A partir des informations obtenues sur les propriétés en traction uniaxiale et en fatigue, et en s'inspirant des modèles numériques qui ont été mis en place, on peut envisager de développer des modèles d'endommagement pour prédire le nombre de cycles à rupture ou la ductilité en traction par exemple. Pour cela, il faudrait bien entendu avoir accès à des essais expérimentaux supplémentaires en fatigue et en ténacité, associés à des observations au niveau de la microstructure.

Le comportement à plus haute température est également un sujet à développer, puisque les alliages de titane β-métastable peuvent être utilisés en température. A ce titre, on propose en annexe (F) une étude sur les déformations plastiques générées par la dilatation anisotrope de la phase α. Des caractéristiques mécaniques y sont proposées pour la phase α à haute température. On peut également envisager de simuler des essais de fluage afin de tester nos modèles et de comparer les résultats avec des essais experimentaux.

Bibliographie

[Aeby-Gautier *et al.*, 2011] Aeby-Gautier, E., Denand, B., Teixeira, J., Dehmas, M., Appolaire, B. et Settefrati, S. (2011). Influence of microstructure on tensile properties of beta-metastable Ti17 alloy. *In 12th World Conference on titanium*, Beijing.

[Ahzi *et al.*, 1993] Ahzi, S., Asaro, R. et Parks, D. (1993). Application of crystal plasticity theory for mechanically processed BSCCO super-conductors. *Mech. of Materials*, 15:201–222.

[Ankem et Margolin, 1986] Ankem, S. et Margolin, H. (1986). A rationalization of stress-strain behavior of two-ductile phase alloys. *Metallurgical Transaction*, 17A:2209–2225.

[Asaro et Needleman, 1985] Asaro, R. et Needleman, A. (1985). Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals. *Acta Metall.*, 33:923–953.

[Ausias *et al.*, 2007] Ausias, G., Thuillier, S., Omnès, B., Wiessner, S. et Pilvin, P. (2007). Micro-mechanical model of tpe made of polypropylene and rubber waste. *polymer*, 48:3367–3376.

[Batdorf et Budianski, 1949] Batdorf, S. et Budianski, B. (1949). A mathematical theory of plasticity based on the concept of slip. *NACA, TN-1871*.

[Berbenni, 2002] Berbenni, S. (2002). *Emastoviscoplasticité des aciers polycristallins : modélisation micromécanique et physique, et applications au comportement dynamique et à l'effet bake hardening*. Thèse de doctorat, Univ. de Metz.

[Berbenni *et al.*, 2004] Berbenni, S., Favier, V., Lemoine, X. et Berveiller, M. (2004). Micromechanical modeling of the elastic–viscoplastic behavior of steels having different microstructures. *Material Science and Engineering A*, 372:128–136.

[Berveiller et Zaoui, 1979] Berveiller, M. et Zaoui, A. (1979). An extension of the self–consistent scheme to plastically flowing polycrystal. *J. Mech. Phys. Sol.*, 26:325–344.

[Besson *et al.*, 2001] Besson, J., Cailletaud, G., Chaboche, J.-L. et Forest, S. (2001). *Mécanique non–linéaire des matériaux*. Hermès.

[Boyer, 1996] Boyer, R. (1996). An overview of the use of titanium in the aerospace industry. *Material Science and Engineering*, A213:103–114.

[Brandes et Brook, 1992] Brandes, B. et Brook, C. (1992). *Smithells metals reference book*. Oxford University Press.

[Brenner *et al.*, 2002] Brenner, R., Masson, R., Castelnau, O. et Zaoui, A. (2002). A "quasi-elastic" affine formulation for the homogenised behavior of nonlinear viscoelastic polycrystals and composites. *Eur. J. Mech., A/Solids*, 21:943–960.

[Bridier, 2006] Bridier, F. (2006). *Analyse expérimentale des modes de déformation et d'endommagement par fatigue de l'alliage de titane TA6V. Aspects cristallographiques à différentes échelles*. Thèse de doctorat, Université de Poitiers.

[Budiansky et Wu, 1962] Budiansky, B. et Wu, T. (1962). Theoretical prediction of plastic strains of polycrystals. *In Proc. 4th US Nat. Cong. Appl. Mech.*, pages 1175–1185.

[Burgers, 1934] Burgers, W. (1934). On the process of transition of the cubic-body-centered modification into the hexagonal-close-packed modification of zirconium. *Physica*, 1:561–586.

[Cailletaud, 1987] Cailletaud, G. (1987). *Une approche micromécanique phénoménologique du comportement inélastique des métaux*. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, Paris 6.

[Cailletaud et Pilvin, 1994] Cailletaud, G. et Pilvin, P. (1994). Utilisation de modèles polycristallins pour le calcul par éléments finis. *Revue Européenne des Éléments Finis*, 3(4):515–541.

[Castany, 2007] Castany, P. (2007). *Étude des micromécanismes de déformation d'un alliage Ti-6Al-4V par déformation MET in situ, Influence d'un traitement de surface*. Thèse de doctorat, INSA Toulouse.

[Cazzani et Rovati, 2003] Cazzani, A. et Rovati, M. (2003). Extrema of Young's modulus for cubic and transversely isotropic solids. *Int. J. Sol. Structures*, 40:1713–1744.

[Clément, 2010] Clément, N. (2010). *Phase transformations and mechanical properties of the Ti-5553 beta-metastable titanium alloy*. Thèse de doctorat, UCL.

[Da Costa Teixeira, 2005] Da Costa Teixeira, J. (2005). *Etude expérimentale et modélisation des évolutions microstructurales au cours des traitements thermiques post-forgeage dans l'alliage Ti17*. Thèse de doctorat, INPL.

[Delfosse, 2005] Delfosse, J. (2005). *Forgeage bêta du Ti17, Propriétés en fatigue*. Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Paris.

[Doghri *et al.*, 2010] Doghri, I., Adam, L. et Bilger, N. (2010). Mean-field homogenization of elasto-viscoplastic composites based on a general incrementally affine linearization method. *Int. J. of Plasticity*, 26:219–238.

[Duval, 2012] Duval, T. (2012). *Analyse multi-échelles des relations microstructures - propriétés mécaniques sous sollicitation monotone et cyclique des alliages de titane beta-métastable*. Thèse de doctorat, ENSMA.

[Escalé, 2012] Escalé, N. (2012). *Etude par Microscopie Electronique en Transmission des microstructures et des micromécanismes de déformations d'alliages de titane beta-métastables*. Thèse de doctorat, CEMES.

[Eshelby, 1957] Eshelby, J. (1957). The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proc. Royal Soc. London*, 241:376–396.

[Favier *et al.*, 2003] Favier, V., Sabar, H., Berveiller, M. et Berbenni, S. (2003). New self-consistent approach for inelastic materials based on translated fields. *J. Phys. IV France*, 105:231–238.

[François *et al.*, 1991] François, D., Pineau, A. et Zaoui, A. (1991). *Comportement mécanique des matériaux. Volume 1 : élasticité et élastoplasticité*. Hermès.

[Fréour *et al.*, 2002] Fréour, S., Gloaguen, D., Francois, M., Guillén, R., Girard, E. et Bouillo, J. (2002). Determination of the macroscopic elastic constants of a phase embedded in a multiphase polycrystal - application to the beta-phase of Ti17 titanium based alloy. *Materials Science Forum*, 404-407:723–728.

[Fréour *et al.*, 2011] Fréour, S., Lacoste, E., Francois, M. et Guillén, R. (2011). Determining Ti-17 beta-phase single-crystal elasticity constants through X-ray diffraction and inverse scale transition model. *Materials Science Forum*, 681:97–102.

[Gairola et Kröner, 1981] Gairola, B. et Kröner, E. (1981). A simple formula for calculating the bounds and the self-consistent value of the shear modulus of a polycrystalline aggregate of cubic crystals. *Int. J. of Engng Science*, 19:865–869.

[Gerday, 2009] Gerday, A.-F. (2009). *Mechanical behavior of Ti-5553 alloy. Modeling of representative cells*. Thèse de doctorat, University of Liège.

[Gourbesville, 2000] Gourbesville, O. (2000). *Caractérisation par DRX de la microstructure d'alliages à base de nickel (718) et à base de titane (Ti17) forgés et traités. Prévision des propriétés mécaniques*. Thèse de doctorat, ENSAM.

[Harren, 1991] Harren, S. (1991). The finite deformation of rate-dependent polycrystals. II : A comparison of the self-consistent and Taylor methods. *J. Mech. Phys. Sol.*, 39(3): 361–383.

[Herbig, 2011] Herbig, M. (2011). *3D short fatigue crack investigation in beta titanium alloys using phase and diffraction contrast tomography*. Thèse de doctorat, INSA Lyon.

[Hershey, 1954] Hershey, A. (1954). The elasticity of an isotropic aggregate of anisotropic cubic crystals. *J. of Applied Mechanics*, 21:236–240.

[Hill, 1965] Hill, R. (1965). Continuum micro–mechanisms of elastoplastic polycrystals. *J. Mech. Phys. Sol.*, 13:89–101.

[Huang, 2004] Huang, Z. (2004). A bridging model prediction of the ultimate strength of composite laminates subjected to biaxial loads. *Composites Science and Technology*, 64:395–448.

[Hutchinson, 1966] Hutchinson, J. (1966). Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. *Proc. Royal Soc. London*, A348:101–127.

[Jones et Hutchinson, 1981] Jones, I. et Hutchinson, W. (1981). Stress-state dependence of slip in titanium-6Al-4V and other H.C.P. metals. *Acta Mat.*, 29:951–968.

[Jones *et al.*, 2009a] Jones, N., Dashwood, R., Dye, D. et Jackson, M. (2009a). Beta phase decomposition in Ti5553. *Acta Mat.*, 57:3830–3839.

[Jones *et al.*, 2009b] Jones, N., Dashwood, R., Dye, D. et Jackson, M. (2009b). Development of chevron-shaped alpha precipitates in Ti5553. *Scripta Metallurgica and Materiala*, 60:571–573.

[Jones *et al.*, 2009c] Jones, N., Dashwood, R., Dye, D. et Jackson, M. (2009c). The flow behavior and microstructural evolution of Ti5553 during subtransus isothermal forging. *Metallurgical and Materials Transactions*, 40A:1944–1954.

[Kouddane *et al.*, 1993] Kouddane, R., Molinari, A. et Canova, G. (1993). *MECAMAT'91, Large Plastic Deformations, Fundamentals and Application*, chapitre Self-consistent modelling of heterogeneous viscoelastic and elastoplastic materials, pages 185–192. Rotterdam ; Brookfield , A.A. Balkema.

[Kröner, 1958] Kröner, E. (1958). Berechnung der elastischen Konstanten des Vielkristalls aus des Konstanten des Einkristalls. *Z. Physik*, 151:504–518.

[Kröner, 1961] Kröner, E. (1961). Zur plastischen Verformung des Vielkristalls. *Acta Metall.*, 9:155–161.

[Kuroda *et al.*, 1998] Kuroda, D., Niinomi, M., Morinaga, M., Kato, Y. et Yashiro, T. (1998). Design and mechanical properties of new beta type titanium alloys for implant materials. *Material Science and Engineering A*, 243:244–249.

[Kuzmenkov, 2012] KUZMENKOV, K. (2012). *Etude de l'effet du temps de maintien sur le comportement et la rupture de l'alliage Ti-6242*. Thèse de doctorat, MINES ParisTech.

[Lantuejoul, 2002] LANTUEJOUL, C. (2002). *Geostatistical simulation : models and algorithms*. Springer.

[Lebensohn et Tomé, 1993] LEBENSOHN, R. et TOMÉ, C. (1993). A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals : Application to zirconium alloys. *Acta Metall.*, 41:2611.

[Lebensohn et Tomé, 1994] LEBENSOHN, R. et TOMÉ, C. (1994). A self-consistent viscoplastic model : Prediction of rolling textures of anisotropic polycrystals. *Material Science and Engineering A*, 175:71.

[Ledbetter *et al.*, 2004] LEDBETTER, H., OGI, H., KAI, S., KIM, S. et HIRAO, M. (2004). Elastic constants of body-centered-cubic titanium monocrystals. *J. of Applied Physics*, 95:4642–4644.

[Lemaitre et Chaboche, 1985] LEMAITRE, J. et CHABOCHE, J.-L. (1985). *Mécanique des matériaux solides*. Dunod, Paris.

[Li et Weng, 1997] LI, J. et WENG, G. (1997). A secant-viscosity approach to the time-dependent creep of an elastic–viscoplastic composite. *J. Mech. Phys. Sol.*, 45:1069–1083.

[Lin, 1957] LIN, T. (1957). Analysis of elastic and plastic strain in FCC crystal. *J. Mech. Phys. Sol.*, 5:143.

[Lütjering et Williams, 2007] LÜTJERING, G. et WILLIAMS, J. (2007). *Titanium*. Springer.

[Lütjering *et al.*, 2000] LÜTJERING, G., WILLIAMS, J. et GYSLER, A. (2000). *Microstructure and properties of materials, Volume 2*, chapitre 1. J.C.M. Li.

[Masson et Zaoui, 1999] MASSON, R. et ZAOUI, A. (1999). Self-consistent estimates for the rate-dependent elastoplastic behaviour of polycrystalline materials. *J. Mech. Phys. Sol.*, 47:1543–1568.

[Méric et Cailletaud, 1991] MÉRIC, L. et CAILLETAUD, G. (1991). Single crystal modeling for structural calculations. Part 2 : Finite element implementation. *J. of Engng. Mat. Technol.*, 113:171–182.

[Méric *et al.*, 1991] MÉRIC, L., POUBANNE, P. et CAILLETAUD, G. (1991). Single crystal modeling for structural calculations. Part 1 : Model presentation. *J. of Engng. Mat. Technol.*, 113:162–170.

[Molinari *et al.*, 1997] MOLINARI, A., AHZI, S. et KOUDDANE, R. (1997). On the self-consistent modeling of elastic-plastic behavior of polycrystals. *Mech. of Materials*, 26:43–62.

[Molinari *et al.*, 1987] MOLINARI, A., CANOVA, G. et AHZI, S. (1987). A self–consistent approach to the large deformation polycrystal viscoplasticity. *Acta Metall.*, 35:2983–2994.

[Morawiec, 2004] MORAWIEC, A. (2004). *Orientations and Rotations Computations in Crystallographic Textures*. Springer.

[Mori et Tanaka, 1973] MORI, T. et TANAKA, K. (1973). Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metall.*, 21:571–574.

[Mura, 1987] MURA, T. (1987). *Micromechanics of defects in solids*. Martinus Nijhoff.

[Nemat-Nasser et Obata, 1986] NEMAT-NASSER, S. et OBATA, M. (1986). Rate-dependent, finite elasto-plastic deformation of polycrystals. *Proc. Royal Soc. London, A*, 407:343–375.

[Ogi *et al.*, 2004] Ogi, H., Kai, S., Ledbetter, H., Tarumi, R., Hirao, M. et Takashima, K. (2004). Titanium's high-temperature elastic constants through the hcp–bcc phase transformation. *Acta Mat.*

[Paquin *et al.*, 2001] Paquin, A., Berbenni, S., Favier, V., Lemoine, X. et Berveiller, M. (2001). Micromechanical modelling of the elastic-viscoplastic behavior of pollycrystalline steels. *Int. J. of Plasticity*, 17:1267–1302.

[Paquin *et al.*, 1999] Paquin, A., Sabar, H. et Berveiller, M. (1999). Integral formulation and self-consistent modelling of elastoviscoplastic behavior of heterogeneous materials. *Arch. Appl. Mech.*, 69:14–35.

[Petry *et al.*, 1991] Petry, W., Heiming, A., Trampenau, J., Alba, M., Herzig, C., Schober, H. et Vogl, G. (1991). Phonon dispersion of the bcc phase of group-IV metals. I. bcc titanium. *Phys. Rev. B*, 43.

[Pilvin, 1994] Pilvin, P. (1994). The contribution of micromechanical approaches to the modelling of inelastic behaviour. *In* Pineau, A., Cailletaud, G. et Lindley, T., éditeurs : *4th Int. Conf. on Biaxial/multiaxial Fatigue, Saint–Germain, France*, volume 1, pages 31–46. ESIS.

[Pilvin et Cailletaud, 1990] Pilvin, P. et Cailletaud, G. (1990). Intergranular and transgranular hardening in viscoplasticity. *In* Zyczkowski, M., éditeur : *Creep in Structures*, volume 4, pages 171–178.

[Reid *et al.*, 1973] Reid, C., Routbort, J. et Maynard, R. (1973). Elastic constants of Ti 40 at./ *J. of Applied Physics*, 44(22):1398–1399.

[Reuss, 1929] Reuss, A. (1929). Berechnung der Fliessgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle. *J. Appl. Math. & Mech.*, 9:49–58.

[Rivest *et al.*, 1996] Rivest, J., Soille, P. et Beucher, S. (1996). Morphological gradients. *Spie Milestone Series MS*.

[Rougier *et al.*, 1994] Rougier, Y., Stolz, C. et Zaoui, A. (1994). Self-consistent modeling of elastic–viscoplastic polycrystals. *C. R. Acad. Sci. Paris*, 318:145–151.

[Sabar *et al.*, 2002] Sabar, H., Berveiller, M., Favier, V. et Berbenni, S. (2002). A new class of micro–macro models for elastic–viscoplastic heterogeneous materials. *Int. J. Sol. Structures*, 39:3257–3276.

[Sachs, 1928] Sachs, G. (1928). Zur Ableitung einer Fliessbedingung. *Z. VDI*, 72:734–736.

[Savage *et al.*, 2004] Savage, M., Tatalovich, J. et Mills, M. (2004). Anisotropy in the room-temperature deformation of aplha-beta colonies in titanium alloys : role of the alpha-beta interface. *Philosophical Magasine*, 84(11):1127–1154.

[Settefrati, 2012] Settefrati, A. (2012). *Etude expérimentale et modélisation par champ de phase de la formation de alpha dans les alliages de titane beta-métastable*. Thèse de doctorat, Institut Jean Lamour, Université de Nancy.

[Simmons et Wang, 1971] Simmons, G. et Wang, H. (1971). *Single crystal elastic constants and calculated aggregate properties*. MIT Press.

[Suri *et al.*, 1998] Suri, S., Viswanathan, G., Neeraj, T., Hou, D. et Mills, M. (1998). Room temperature deformation and mechanisms of slip transmission in oriented single-colony crystals of an alpha beta titanium alloy. *Acta Mat.*, 47:1019–1034.

[Suvorov et Dvorak, 2002] Suvorov, A. et Dvorak, G. (2002). Rate form of the Eshelby and Hill tensors. *Int. J. Sol. Structures*, 39:5659–5678.

[Tamura *et al.*, 1973] TAMURA, I., TOMOTA, Y. et OZAWA, H. (1973). Strength and ductility of Fe-Ni-C alloys composed of austenite and martensite with various strength. *In Proc. of the Int. Conf. on Strength of Metals and Alloys*, volume 1, pages 611–615, Cambridge.

[Tane *et al.*, 2008] TANE, M., AKITA, S., NAKANO, T., HAGIHARA, K., UMAKOSHI, Y., NIINOMI, M. et NAKAJIMA, H. (2008). Peculiar elastic behavior of Ti-Nb-Ta-Zr single crystals. *Acta Mat.*, 56:2856–2863.

[Taylor, 1938] TAYLOR, G. (1938). Plastic strain in metals. *J. Inst. Metals.*, 62:307–324.

[Transvalor et ENSMP, 2010] TRANSVALOR et ENSMP (2010). *ZéBuLon 8.4.4 References Manuals*.

[Tricot, 1988] TRICOT, R. (1988). Traitements thermomécaniques des alliages de titane pour l'aéronautique. *Matériaux et Techniques*, 76:47–64.

[Venkatarami *et al.*, 2007a] VENKATARAMI, G., GHOSH, S. et MILLS, M. (2007a). A size dependent crystal plasticity FE model for creep and load shedding in polycrystalline Ti alloys. *Acta Mat.*

[Venkatarami *et al.*, 2007b] VENKATARAMI, G., KIRANE, K. et GHOSH, S. (2007b). Microstructural parameters affecting creep induced load shedding in Ti-6242 by a size dependent crystal plasticity FE model. *Acta Mat.*

[Voigt, 1887] VOIGT, W. (1887). Theoretische Studien über die Elasticitätsverhältnisse der Krystalle. *Abh.Kgl.Ges.Wiss.Göttingen*, 34:3–51.

[Welk, 2010] WELK, B. (2010). *Microstructural and property relationships in beta-titanium alloy Ti-5553*. Thèse de doctorat, Ohio State University.

[Weng, 1982] WENG, G. (1982). A unified self-consistent theory for the plastic-creep deformation of metals. *J. of Applied Mechanics*, 49:728–734.

[Zaefferer, 2003] ZAEFFERER, S. (2003). A study of active deformation systems in titanium alloys : dependence on alloy composition and correlation with deformation texture. *Material Science and Engineering A*, 344:20–30.

[Zaoui, 1970] ZAOUI, A. (1970). *Distribution continue de dislocations : théorie générale et quelques applications*. Thèse de doctorat, Université de Paris.

[Zaoui et Masson, 1998] ZAOUI, A. et MASSON, R. (1998). *Modelling stress-dependent transformation strains of heterogeneous materials*, pages 3–15. Kluwer Academics Publishers.

[Zaoui et Raphanel, 1991] ZAOUI, A. et RAPHANEL, J. (1991). *On the nature of the intergranular accommodation in the modeling of elastic-plastic behavior of crystalline materials*, page 185.

[Zarkades et Larson, 1970] ZARKADES, A. et LARSON, F. (1970). *The Science, Technology and Application of Titanium*. Pergamon Press.

Annexe A

Notations utilisées dans le manuscrit

A.1 Abréviations

ACAP : Modèle à champs moyens basé sur le schéma auto-cohérent de Hill et sur l'introduction d'un opérateur tangent local élasto-plastique, associé à un comportement local élasto-viscoplastique.

ACAVP : Modèle à champs moyens basé sur le schéma auto-cohérent de Hill et sur l'introduction d'un opérateur tangent local élasto-viscoplastique, associé à un comportement local élasto-viscoplastique.

bcc : Réseau cubique centré.

BZ : Modèle à champs moyens de Berveiller - Zaoui.

CRSS : Cission résolue critique.

EBSD : Electron BackScatter Diffraction en anglais, outil permettant d'obtenir des figures de pôle inverses.

EF : Elements Finis.

EXP : Expérience.

FFT : Méthode de la transformée de Fourier rapide.

GB : Microstructure de type Grain Boundary.

hcp : Réseau hexagonal compact.

HEM : Milieu homogène équivalent.

KBW : Modèle à champs moyens de Kröner - Budiansky - Wu.

LCF : Fatigue oligocyclique.

MBD : Messier - Bugatti - Dowty.

MEB : Microscopie électronique à balayage.

MET : Microscopie électronique à transmission.

MOI : Microscopie optique interférométrique.

SIM : simulation.

TCC : Transformation Continue au Chauffage.

TTT : Temps-Température-Transformation.

VER : Volume élémentaire représentatif.

WGB : Microstructure de type *W*idmanstätten *G*rain *B*oundary.

WI : Microstructure de type *W*idmanstätten *I*ntragranulaire.

A.2 Vecteurs, tenseurs, matrices, ...

$\{a\}$: Vecteur (taille n quelconque)

$[a]$: Matrice (taille n x m quelconque)

$\underset{\sim}{a}$: Tenseur du second ordre

$dev(\underset{\sim}{a})$: Déviateur du tenseur $\underset{\sim}{a}$

$Tr(\underset{\sim}{a})$: Trace du tenseur $\underset{\sim}{a}$

$\underset{\sim\sim}{a}$: Tenseur du quatrième ordre

A.3 Opérateurs

$x = \underset{\sim}{a} : \underset{\sim}{b} \quad x = a_{ij} b_{ij}$

$\underset{\sim}{x} = \underset{\sim}{a} \cdot \underset{\sim}{b} \quad x_{ij} = a_{ik} b_{kj}$

$\underset{\sim}{x} = \underset{\sim\sim}{a} : \underset{\sim}{b} \quad x_{ij} = a_{ijkl} b_{kl}$

$\underset{\sim}{x} = \{a\} \otimes \{b\} \quad x_{ij} = a_i b_j$

$\underset{\sim\sim}{x} = \underset{\sim}{a} \otimes \underset{\sim}{b} \quad x_{ijkl} = a_{ij} b_{kl}$

$\underset{\sim\sim}{x} = \underset{\sim}{a} \underline{\otimes} \underset{\sim}{b} \quad x_{ijkl} = a_{ik} b_{jl}$

$$(f*g)(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x-y)g(y)dy = \int_{-\infty}^{+\infty} f(y)g(x-y)dy$$

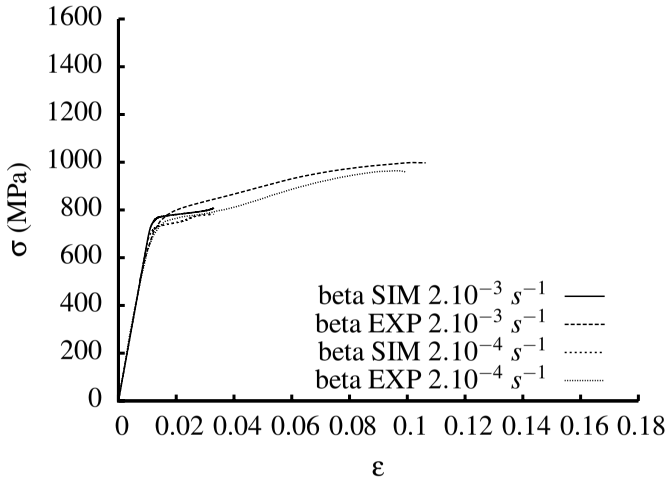
Annexe B

Etude des microstructures du Ti17 et du Ti5553 : courbes de traction expérimentales et simulées

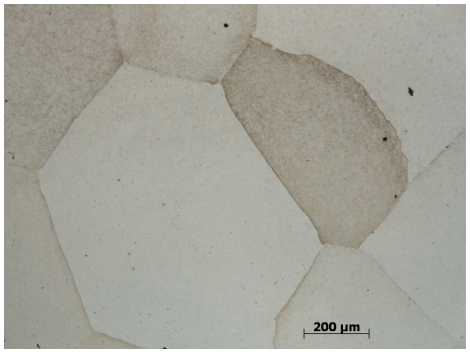
B.1 Alliage Ti17

B.1.1 Ti17 beta [Aeby-Gautier *et al.*, 2011]

Module d'Young	68	GPa	f_α	0	%
Limite d'élasticité	735	MPa	d_α	0	μm
Module élasto-plastique (EP)	3333	MPa	Type		



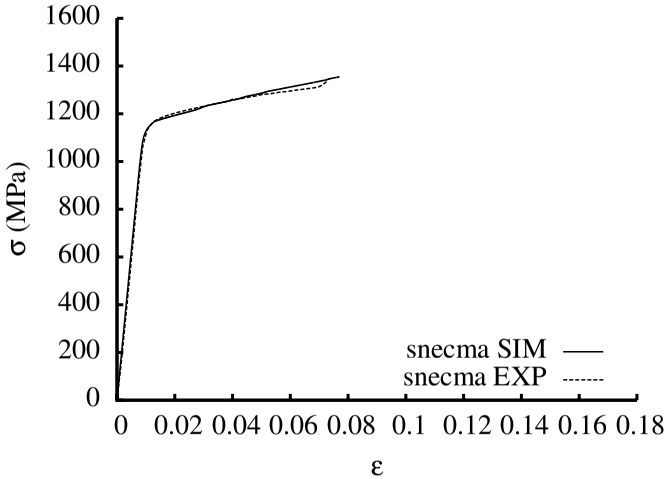
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03}s^{-1}/2.10^{-04}s^{-1}$, Ø = 6 mm



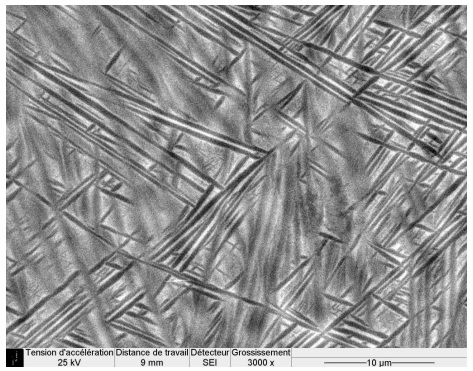
Traitement thermique : | 920°C - 15 min |, | Trempe |.

B.1.2 Ti17 Snecma

Module d'Young	116	GPa	f_α^N	10	%	f_α^n	60	%
Limite d'élasticité	1062	MPa	$d_\alpha^N 1$	1.	μm	$d_\alpha^n 1$	0.52	μm
Module EP	2294	MPa	Type	WGB			WI	

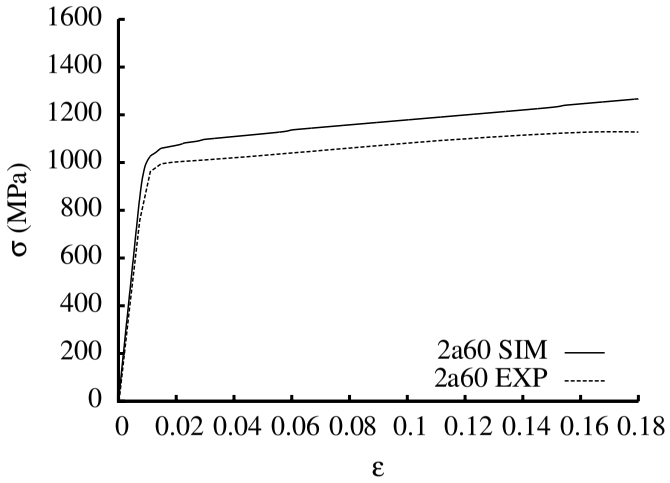


Traction $\dot{\varepsilon} = 1.10^{-03}s^{-1}$, Ø = 6 mm

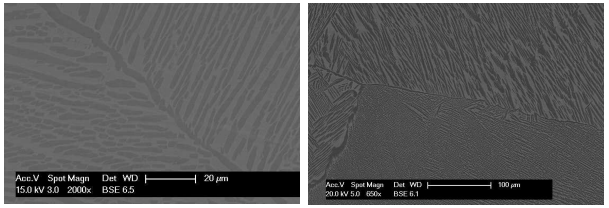


B.1.3 Ti17 2a60a [Aeby-Gautier *et al.*, 2011]

Module d'Young	95.	GPa	f_α	59	%
Limite d'élasticité	963	MPa	d_α	2.42	μm
Module EP	950	MPa	Type	WGB	



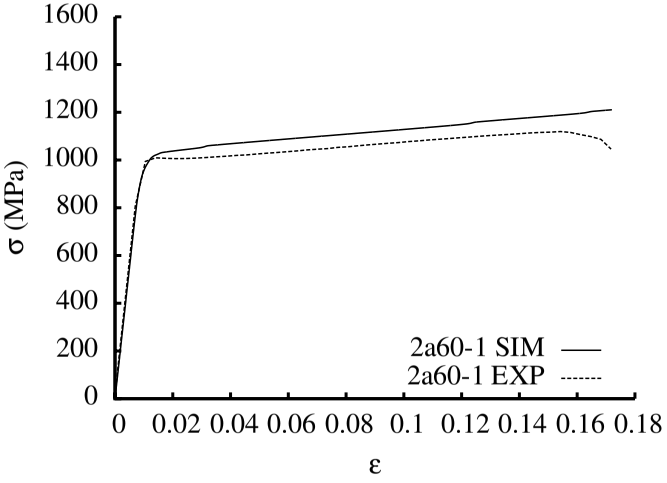
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



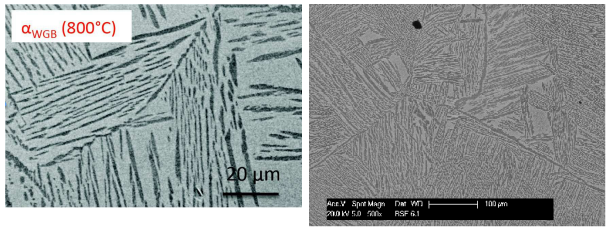
Traitement thermique : | 920°C - 15 min |, | 800°C - 20h |, | -100°C /h jusqu'à 600°C |, | Trempe |.

B.1.4 Ti17 2a60b [Aeby-Gautier *et al.*, 2011]

Module d'Young	95.	GPa	f_α	51	%
Limite d'élasticité	980	MPa	d_α	1.77	μm
Module EP	894	MPa	Type	WGB	



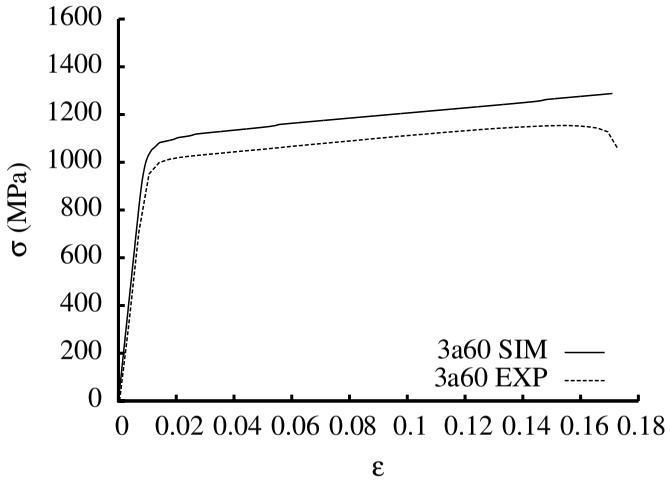
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



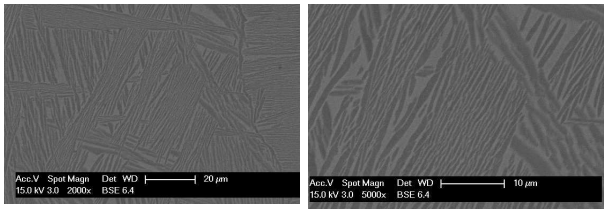
Traitement thermique : | 920°C - 15 min |, | 800°C - 6h |, | -100°C /h jusqu'à 600°C |, | Trempe |.

B.1.5 Ti17 3a60 [Aeby-Gautier *et al.*, 2011]

Module d'Young	128.	GPa	f_α	57	%
Limite d'élasticité	1017	MPa	d_α	1.04	μm
Module EP	1050	MPa	Type	WGB	



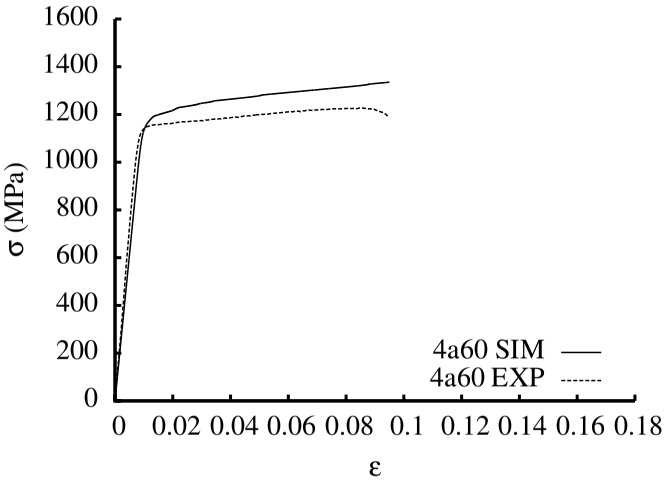
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



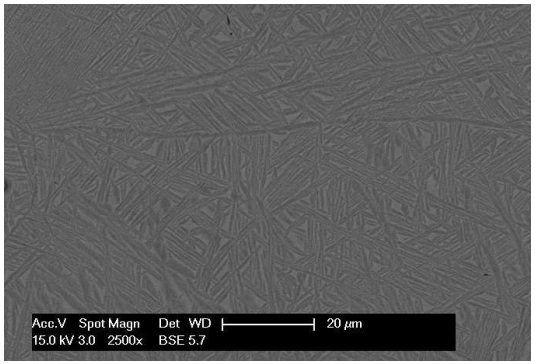
Traitement thermique : | 920°C - 15 min |, | 750°C - 3h |, | -100°C /h jusqu'à 600°C |, | Trempe |.

B.1.6 Ti17 4a60 [Aeby-Gautier *et al.*, 2011]

Module d'Young	128.	GPa	f_α	66	%
Limite d'élasticité	1095	MPa	d_α	0.6	μm
Module EP	1088	MPa	Type	WGB	



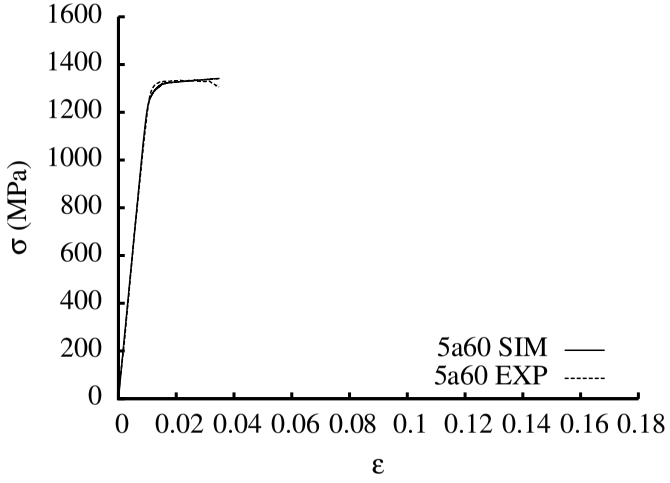
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



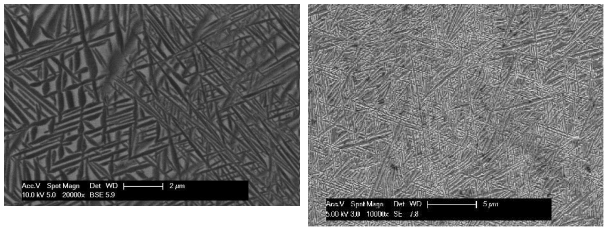
Traitement thermique : | 920°C - 15 min |, | 700°C - 45 min |, | -100°C /h jusqu'à 600°C |, | Trempe |.

B.1.7 Ti17 5a60 [Aeby-Gautier *et al.*, 2011]

Module d'Young	128.	GPa	f_α	69	%
Limite d'élasticité	1254	MPa	d_α	0.27	μm
Module EP	1	MPa	Type	WI	



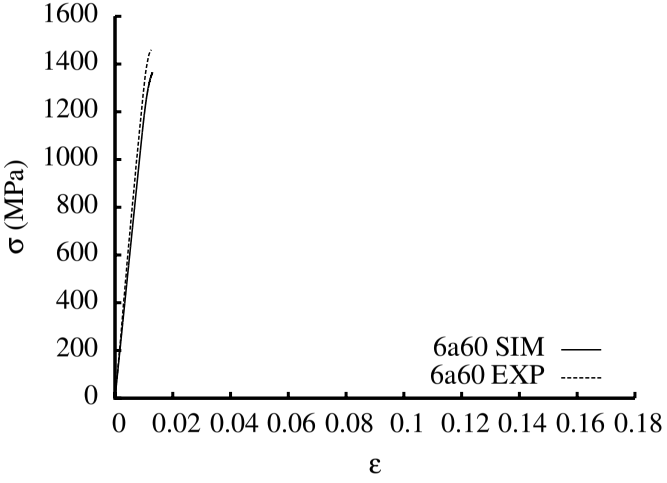
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



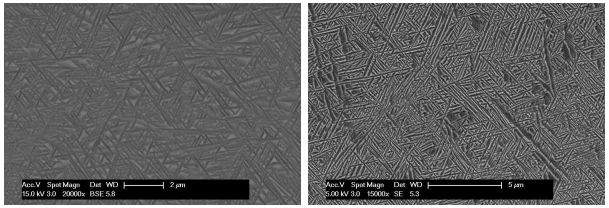
Traitement thermique : | 920°C - 15 min |, | 650°C - 30 min |, | -100°C /h jusqu'à 600°C |, | Trempe |.

B.1.8 Ti17 6a60 [Aeby-Gautier *et al.*, 2011]

Module d'Young	128.	GPa	f_α	61	%
Limite d'élasticité	1394	MPa	d_α	0.09	μm
Module EP	1	MPa	Type	WI	



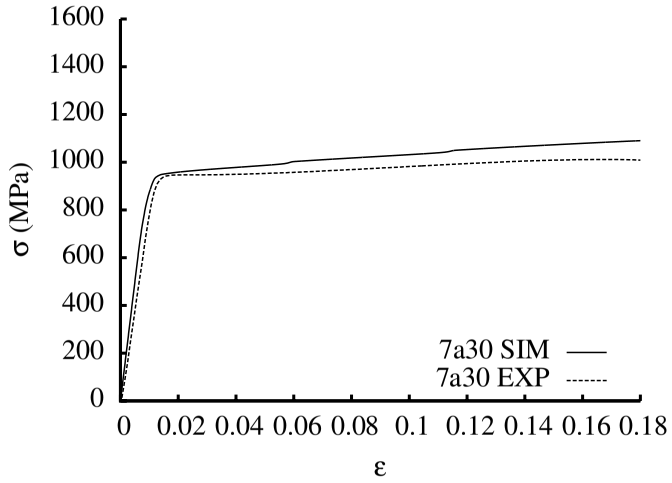
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



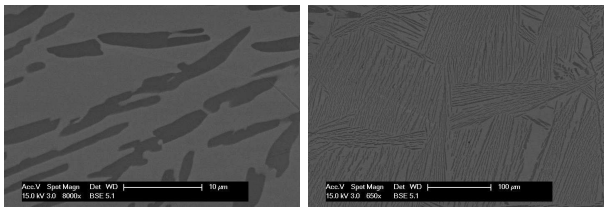
Traitement thermique : | 920°C - 15 min |, | 600°C - 15 min |, | -100°C /h jusqu'à 600°C |, | Trempe |.

B.1.9 Ti17 7a30 [Aeby-Gautier *et al.*, 2011]

Module d'Young	80.	GPa	f_α	33	%
Limite d'élasticité	893	MPa	d_α	1.91	μm
Module EP	510	MPa	Type	WGB	



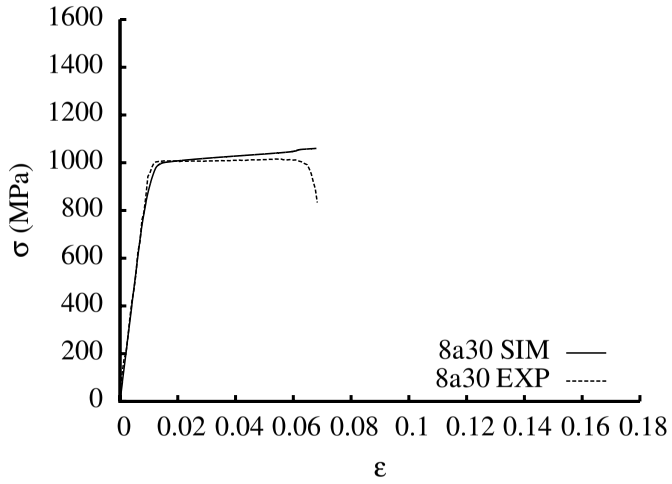
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



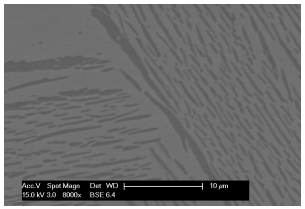
Traitement thermique : | 920°C - 15 min |, | 800°C - 20h |, | Trempe |.

B.1.10 Ti17 8a30 [Aeby-Gautier *et al.*, 2011]

Module d'Young	95.	GPa	f_α	37	%
Limite d'élasticité	943	MPa	d_α	0.42	μm
Module EP	1	MPa	Type	WGB	



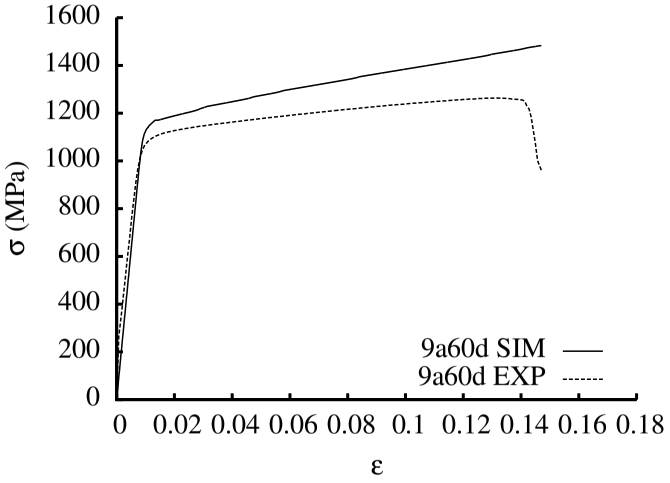
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



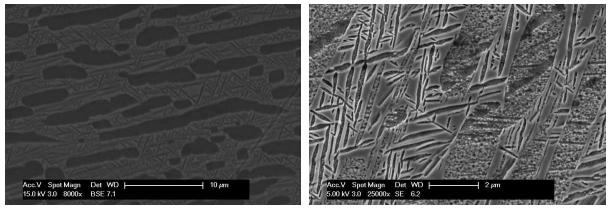
Traitement thermique : | 920°C - 15 min |, | 750°C - 3h |, | 800°C - 10 min |, | Trempe |.

B.1.11 Ti17 9a60a [Aeby-Gautier *et al.*, 2011]

Module d'Young	103	GPa	f_α^N	29	%	f_α^n	40	%
Limite d'élasticité	985	MPa	$d_\alpha^N 1$	1.52	μm	$d_\alpha^n 1$	0.17	μm
Module EP	1269	MPa	Type	WGB			WI	



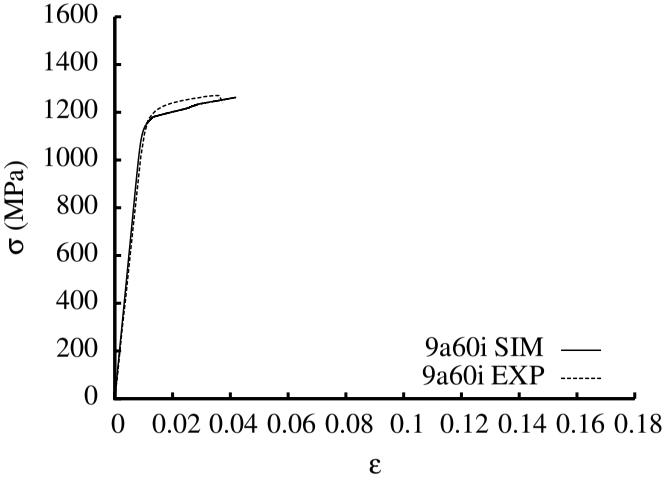
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



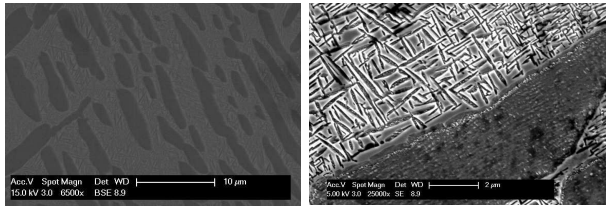
Traitement thermique : | 920°C - 15 min |, | 800°C - 20h |, | Trempe jusqu'à 600°C |, | 600°C - 1h |, | Trempe |.

B.1.12 Ti17 9a60b [Aeby-Gautier *et al.*, 2011]

Module d'Young	112	GPa	f_α^N	27	%	f_α^n	40	%
Limite d'élasticité	1086	MPa	$d_\alpha^N 1$	2.2	μm	$d_\alpha^n 1$	0.14	μm
Module EP	2597	MPa	Type	WGB			WI	



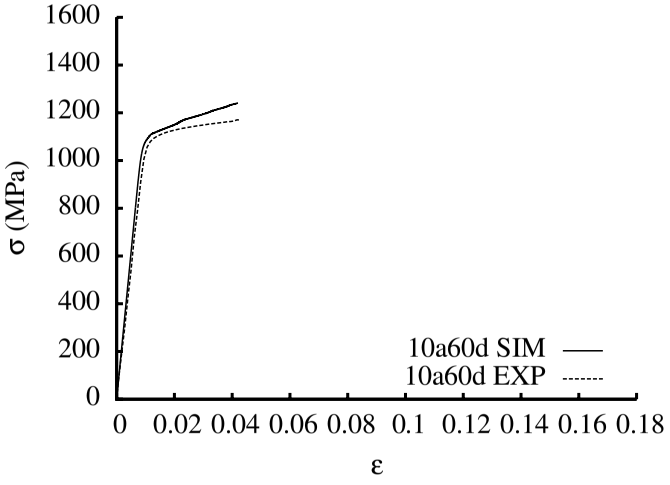
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



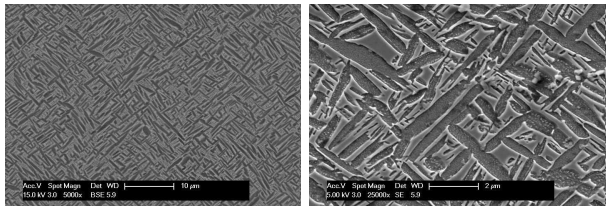
Traitement thermique : | 920°C - 15 min |, | 800°C - 20h |, | Trempe |, | 600°C - 1h |, | Trempe |.

B.1.13 Ti17 10a60a [Aeby-Gautier *et al.*, 2011]

Module d'Young	107	GPa	f_α^N	40	%	f_α^n	27	%
Limite d'élasticité	1008	MPa	$d_\alpha^N 1$	0.76	μm	$d_\alpha^n 1$	0.12	μm
Module EP	2613	MPa	Type	WIp			WIs	



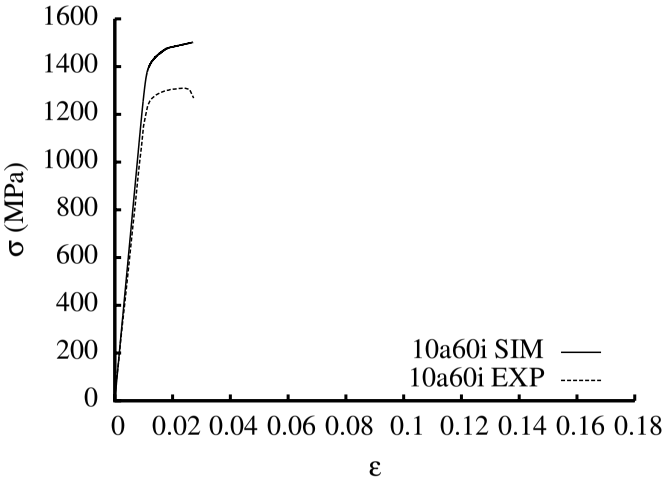
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



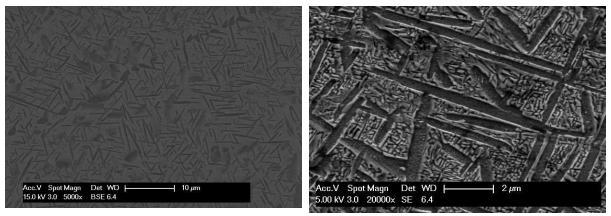
Traitement thermique : | 920°C - 15 min |, | 650°C - 30min |, | 800°C - 4h |, | Trempe jusqu'à 600°C |, | 600°C - 1h |, | Trempe |.

B.1.14 Ti17 10a60b [Aeby-Gautier *et al.*, 2011]

Module d'Young	115.5	GPa	f_α^N	30	%	f_α^n	43	%
Limite d'élasticité	1142	MPa	$d_\alpha^N 1$	0.5	μm	$d_\alpha^n 1$	0.07	μm
Module EP	2301	MPa	Type	WIp			WIs	



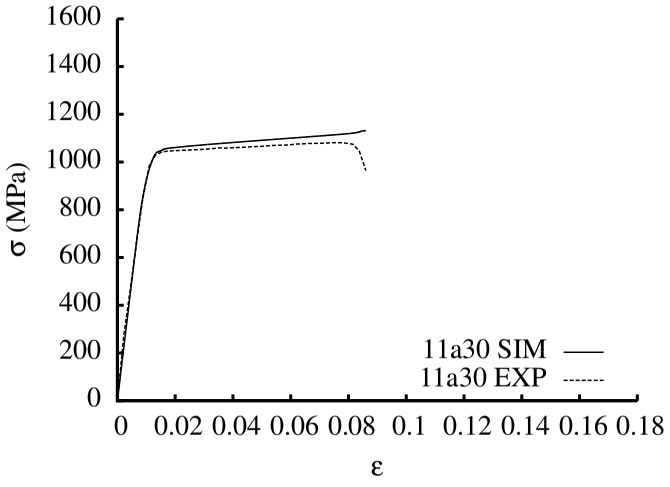
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



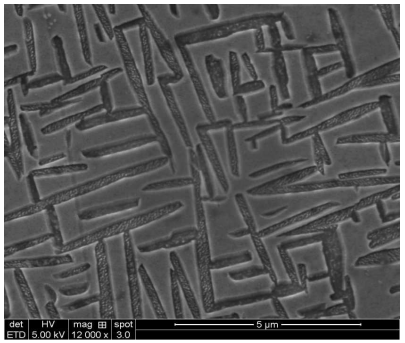
Traitement thermique : | 920°C - 15 min |, | 650°C - 30 min |, | 800°C - 4h |, | Trempe |, | 600°C - 1h |, | Trempe |.

B.1.15 Ti17 11a30 [Aeby-Gautier *et al.*, 2011]

Module d'Young	89.7	GPa	f_α	40	%
Limite d'élasticité	965	MPa	d_α	0.28	μm
Module EP	640	MPa	Type	WI	



Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm

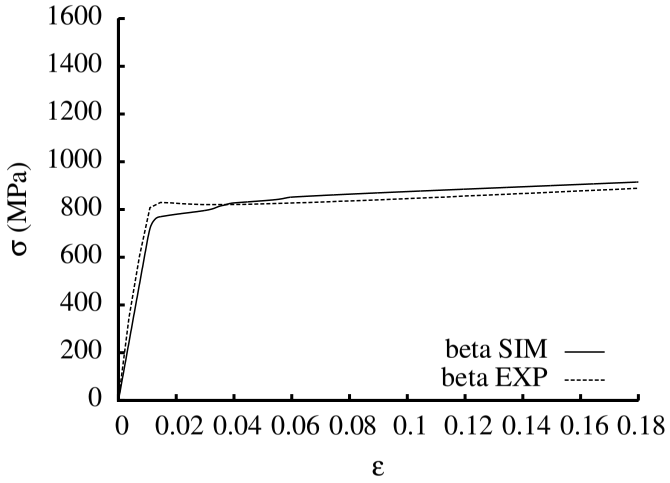


Traitement thermique : | 920°C - 15 min |, | 650°C - 30 min |, | 800°C - 4h |, | Trempe |.

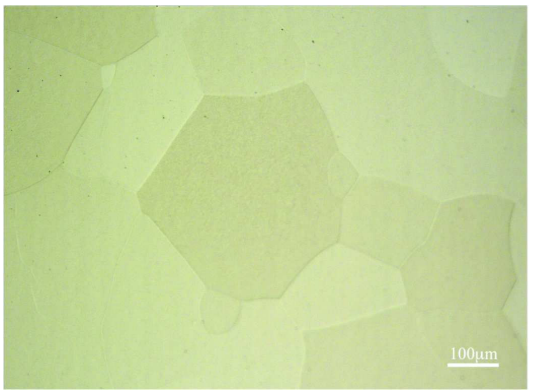
B.2 Alliage Ti5553

B.2.1 Ti5553 beta [Settefrati, 2012]

Module d'Young	72.	GPa	f_α^N	0	%
Limite d'élasticité	815.	MPa	d_α^N	0	μm
Module EP	472.	MPa	Type		



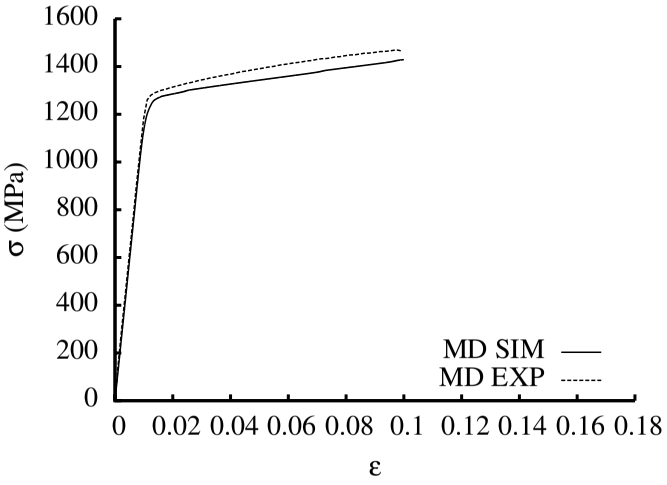
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



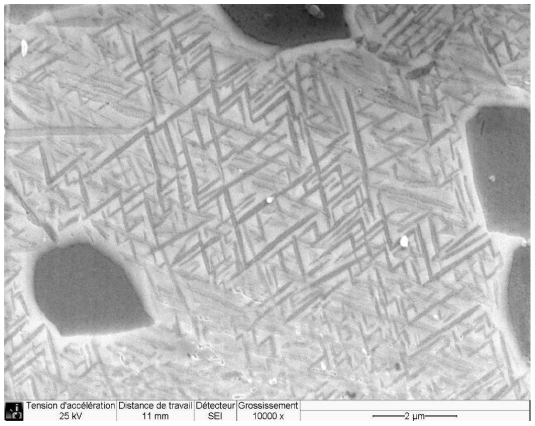
Traitement thermique : | 890°C - 30 min |.

B.2.2 Ti5553 MBD

Module d'Young	120.	GPa	f_α^N	20	%	f_α^n	40	%
Limite d'élasticité	1210	MPa	d_α^N	3	μm	d_α^n	0.13	μm
Module EP	2333	MPa	Type	Nodules			WI	

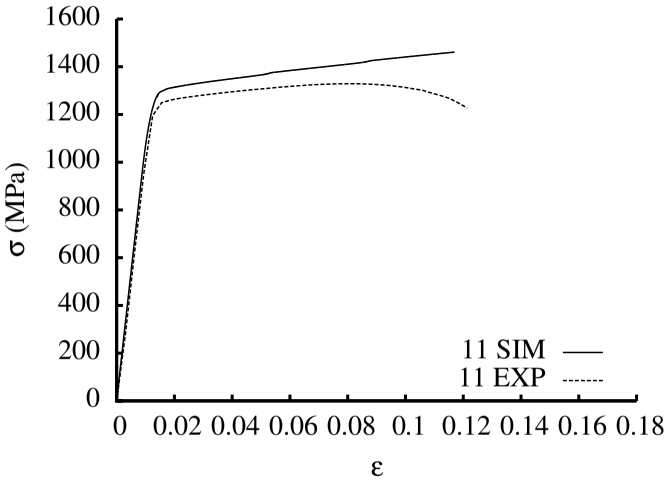


Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm

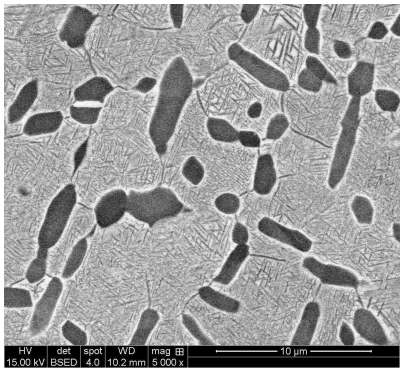


B.2.3 Ti5553 11 [Settefrati, 2012]

Module d'Young	96.4	GPa	f_α^N	20.	%	f_α^n	29.5	%
Limite d'élasticité	1240	MPa	d_α^N	1.2	μm	d_α^n	0.075	μm
Module EP	1316	MPa	Type	Nodules			WI	



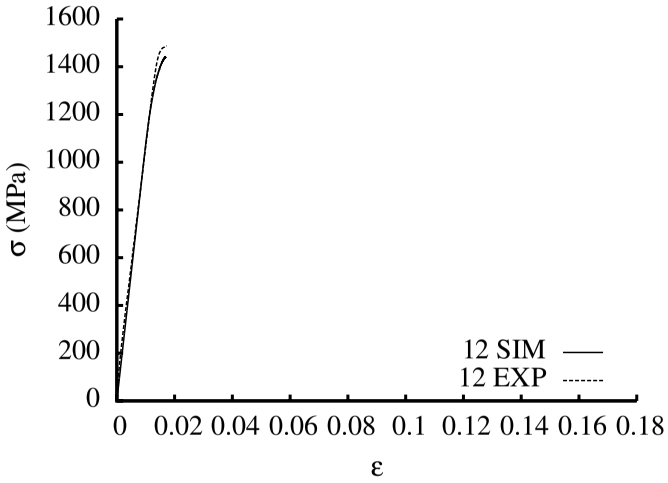
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



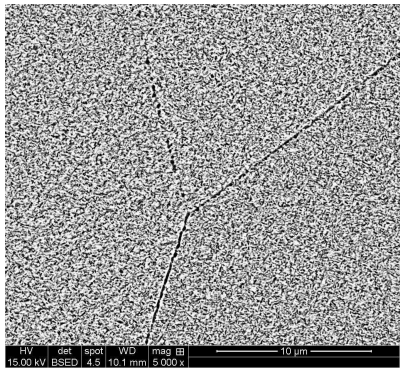
Traitement thermique : | 800°C - 30 min |, | -20°C/min jusqu'à 20°C |,| 620°C - 2h |, | Trempe |.

B.2.4 Ti5553 12 [Settefrati, 2012]

Module d'Young	104.	GPa	f_α^N	48.5	%			
Limite d'élasticité	1434	MPa	d_α^N	0.08	μm			
Module EP	x	MPa	Type	WI				



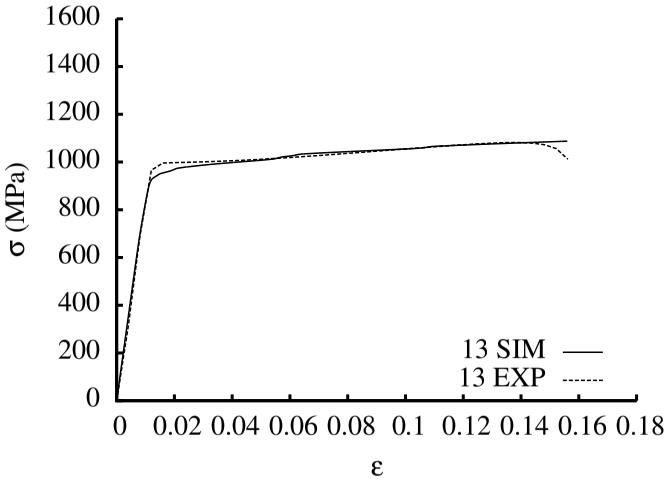
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



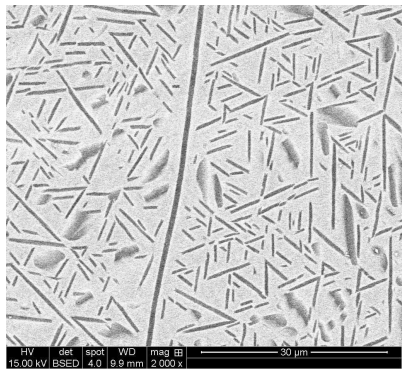
Traitement thermique : | 890°C - 30 min |, | Trempe |,| 620°C - 1h30 |, | Trempe |.

B.2.5 Ti5553 13 [Settefrati, 2012]

Module d'Young	80.	GPa	f_α^N	23.5	%
Limite d'élasticité	980	MPa	d_α^N	0.54	μm
Module EP	740	MPa	Type	WI	



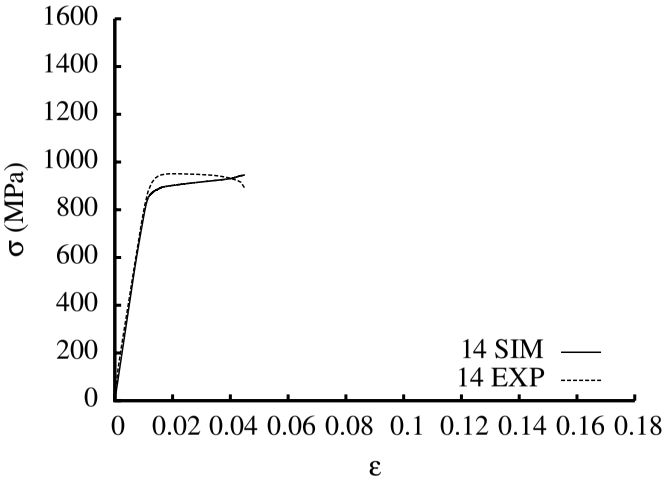
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



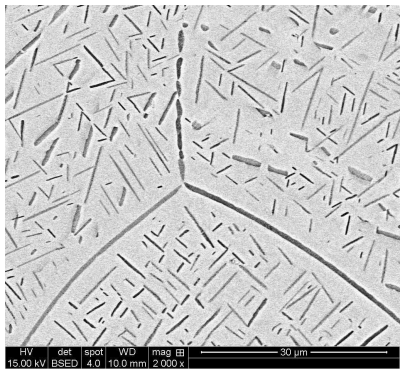
Traitement thermique : | 890°C - 30 min |, | Trempe jusqu'à 620°C |,| 620°C - 1h30 |, | 800°C - 4h |, | ref. 20°C /min |.

B.2.6 Ti5553 14 [Settefrati, 2012]

Module d'Young	76.2	GPa	f_α^N	15.	%
Limite d'élasticité	920	MPa	d_α^N	0.56	μm
Module EP	x	MPa	Type	WI	



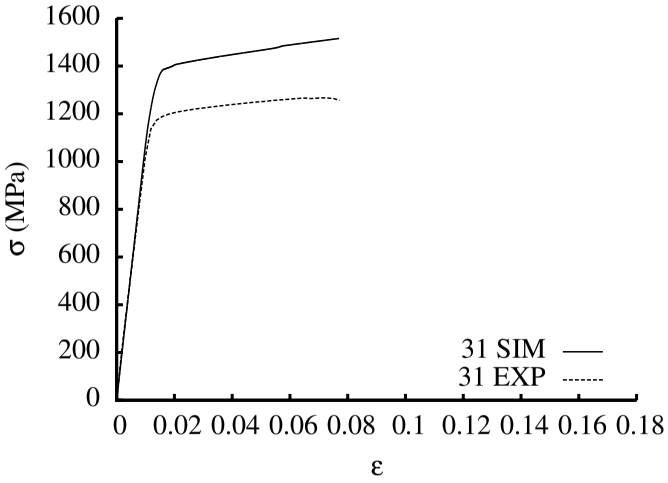
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



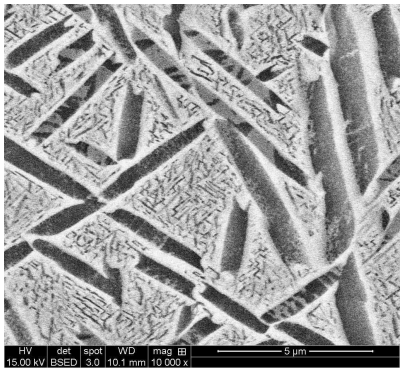
Traitement thermique : | 890°C - 30 min |, | Trempe jusqu'à 620°C |,| 620°C - 1h30 |, | 800°C - 4h |, | Trempe |.

B.2.7 Ti5553 31 [Settefrati, 2012]

Module d'Young	95.4	GPa	f_α^N	25.	%	f_α^n	23.5	%
Limite d'élasticité	1160	MPa	d_α^N	0.8	μm	d_α^n	0.06	μm
Module EP	1320	MPa	Type	WIp			WIs	



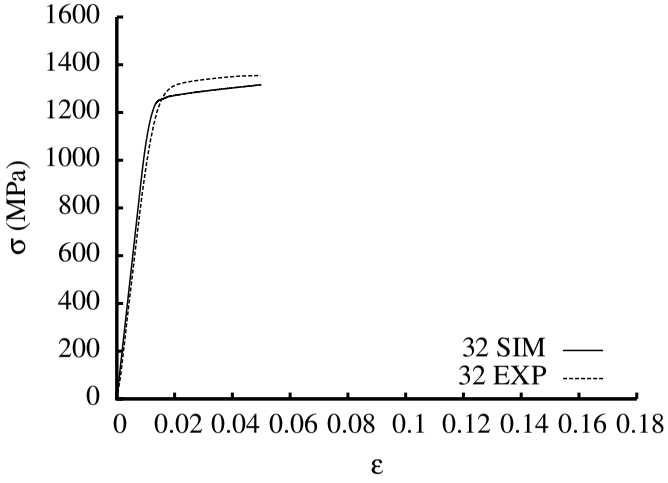
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



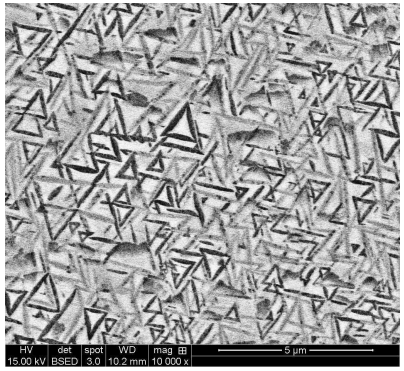
Traitement thermique : | 890°C - 30 min |, | Trempe jusqu'à 620°C |,| 620°C - 1h30 |, | 800°C - 4h |, | ref. 20°C/min |, | 620°C - 2h |, | Trempe |.

B.2.8 Ti5553 32 [Settefrati, 2012]

Module d'Young	96.2	GPa	f_α^N	50.	%			
Limite d'élasticité	1200	MPa	d_α^N	0.22	μm			
Module EP	1400	MPa	Type	WI				



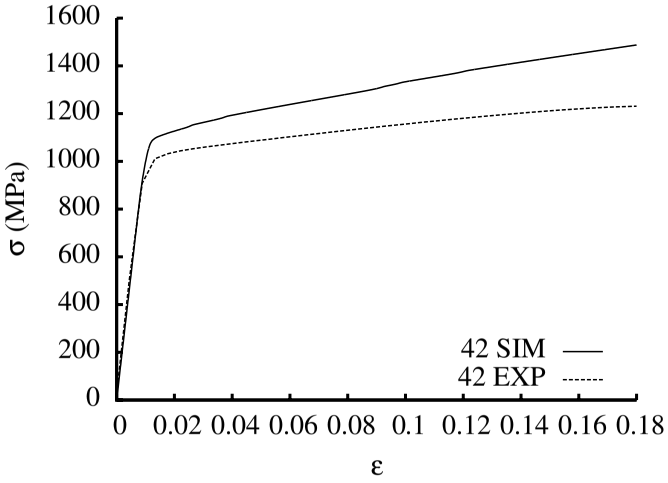
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



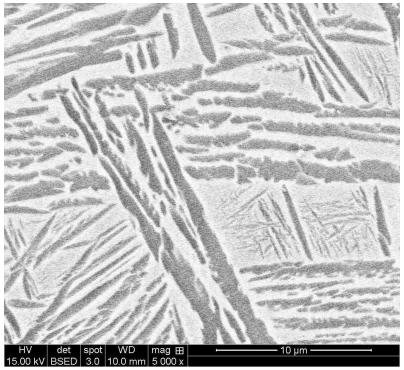
Traitement thermique : | 890°C - 30 min |, | Trempe jusqu'à 620°C |,| 620°C - 1h30 |, | Trempe |.

B.2.9 Ti5553 42 [Settefrati, 2012]

Module d'Young	97.8	GPa	f_α^N	34.5	%	f_α^n	11.5	%
Limite d'élasticité	1000	MPa	d_α^N	0.9	μm	d_α^n	0.08	μm
Module EP	1280	MPa	Type	WGB			WI	



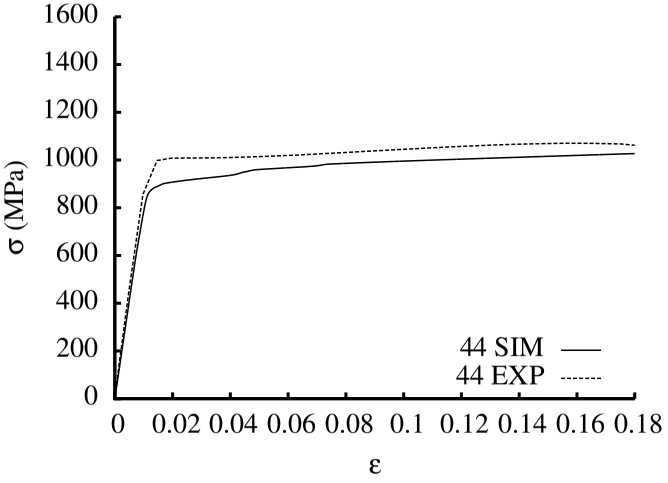
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



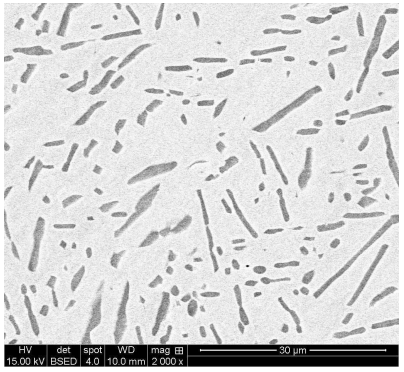
Traitement thermique : | 890°C - 30 min |, | ref. 0.01°C /s jusqu'à 300°C |, | Trempe |.

B.2.10 Ti5553 44 [Settefrati, 2012]

Module d'Young	84.7	GPa	f_α^N	17.	%			
Limite d'élasticité	1000	MPa	d_α^N	0.9	μm			
Module EP	510	MPa	Type	WI				



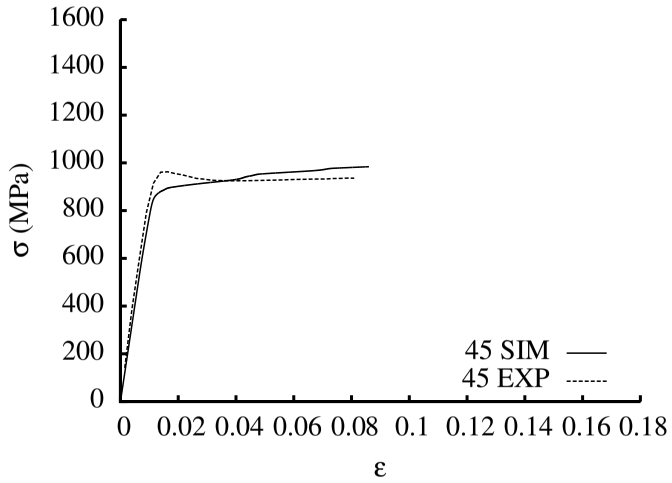
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



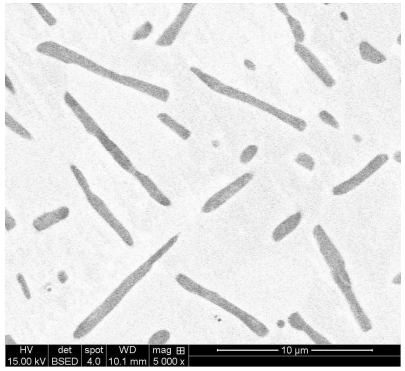
Traitement thermique : | 800°C - 30 min |, | ref. 20°C /min |.

B.2.11 Ti5553 45 [Settefrati, 2012]

Module d'Young	88.5	GPa	f_α^N	15.5	%
Limite d'élasticité	950	MPa	d_α^N	0.67	μm
Module EP	1	MPa	Type	WI	



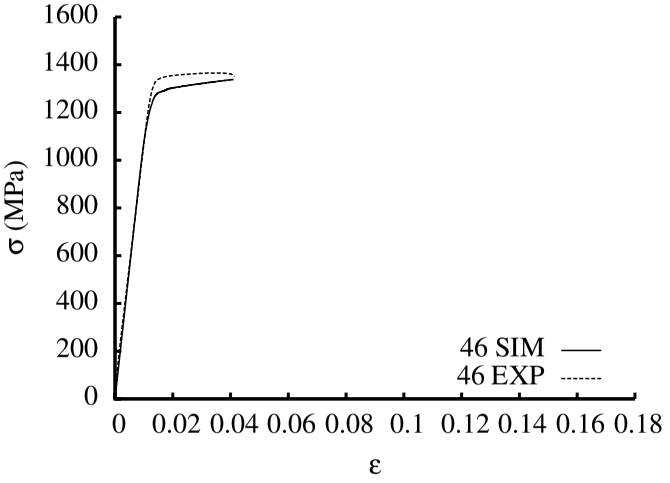
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



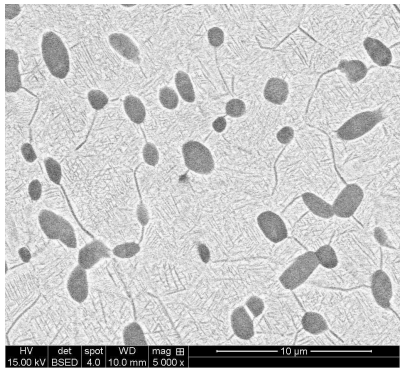
Traitement thermique : | 800°C - 30 min |, | Trempe |.

B.2.12 Ti5553 46 [Settefrati, 2012]

Module d'Young	85.	GPa	f_α^N	15.	%	f_α^n	35.5	%
Limite d'élasticité	1295	MPa	d_α^N	1.5	μm	d_α^n	0.09	μm
Module EP	1111	MPa	Type	Nodules			WI	



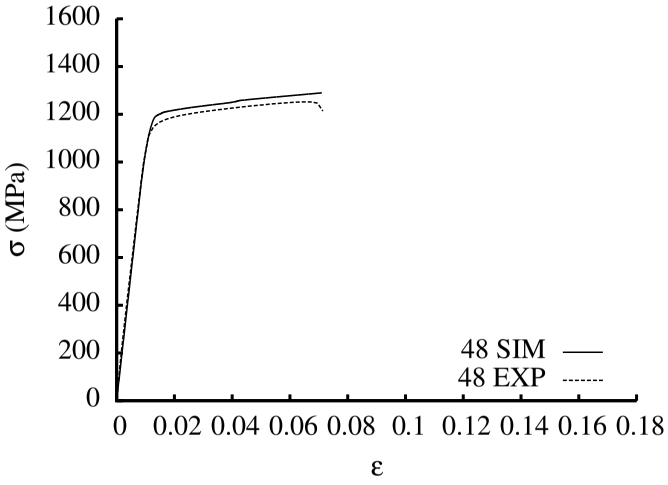
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



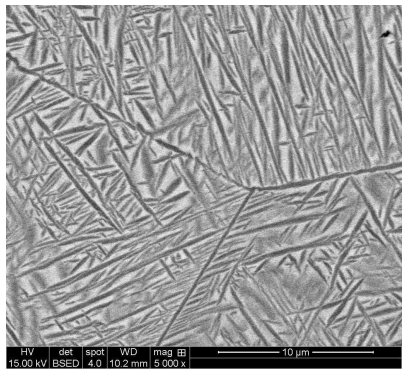
Traitement thermique : | 800°C - 30 min |, | Trempe |, | 620°C - 2h |, | Trempe |.

B.2.13 Ti5553 48 [Settefrati, 2012]

Module d'Young	106.3	GPa	f_α^N	48.	%
Limite d'élasticité	1130	MPa	d_α^N	0.3	μm
Module EP	1480	MPa	Type	WI	



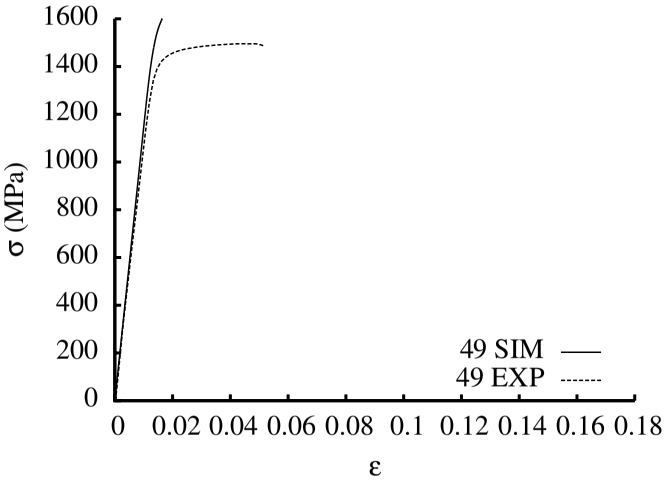
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



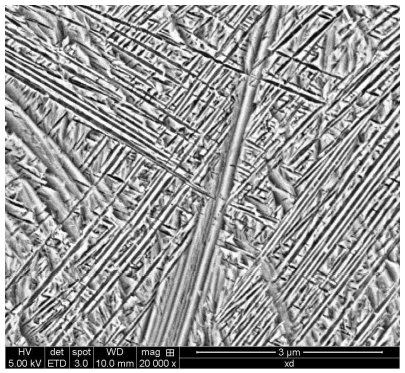
Traitement thermique : | 890°C - 30 min |, | 620°C - 1h30 |, | Trempe |.

B.2.14 Ti5553 49 [Settefrati, 2012]

Module d'Young	105.5	GPa	f_α^N	57.	%
Limite d'élasticité	1350	MPa	d_α^N	0.07	μm
Module EP	1560	MPa	Type	WI	



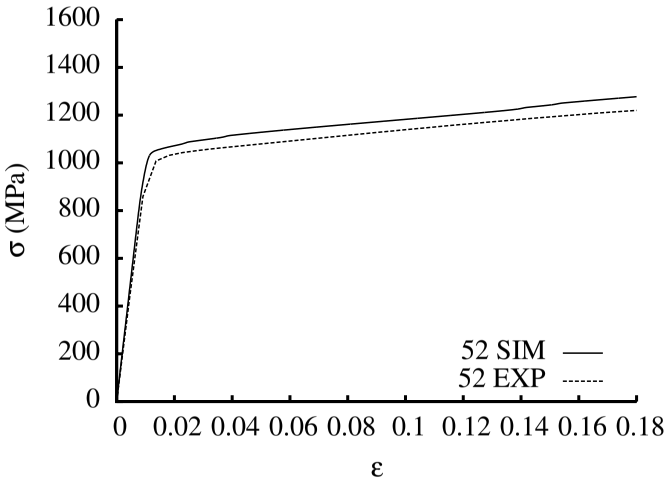
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



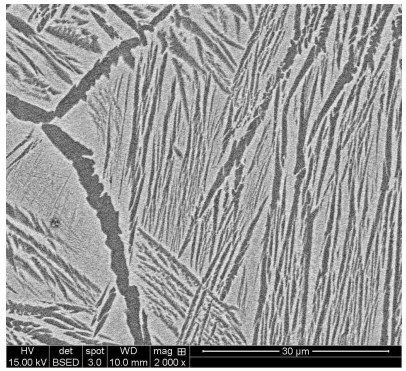
Traitement thermique : | 890°C - 30 min |, | 550°C - 1h30 |, | Trempe |.

B.2.15 Ti5553 52 [Settefrati, 2012]

Module d'Young	95.	GPa	f_α^N	22.5	%	f_α^n	22.5	%
Limite d'élasticité	1015	MPa	d_α^N	1.13	μm	d_α^n	0.25	μm
Module EP	1140	MPa	Type	WGB			WI	



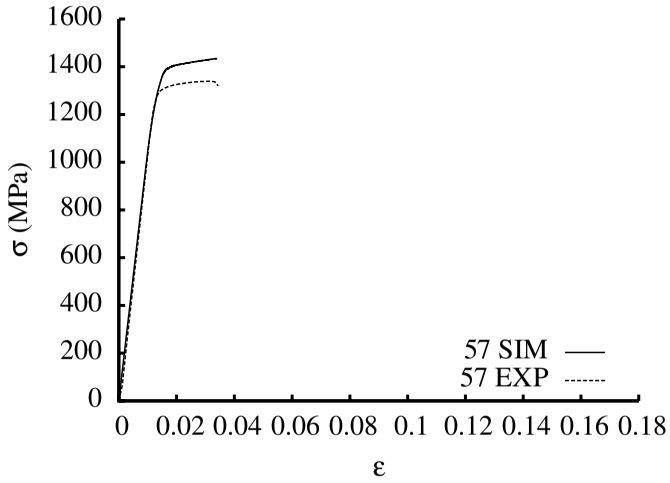
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



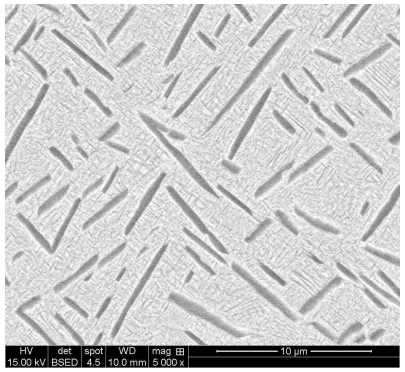
Traitement thermique : | 890°C - 30 min |, | ref. 0.01°C /s jusqu'à 550°C |, | Trempe |.

B.2.16 Ti5553 57 [Settefrati, 2012]

Module d'Young	103.	GPa	f_α^N	10.	%	f_α^n	35.	%
Limite d'élasticité	1255	MPa	d_α^N	0.6	μm	d_α^n	0.067	μm
Module EP	700	MPa	Type	WIp			WIs	



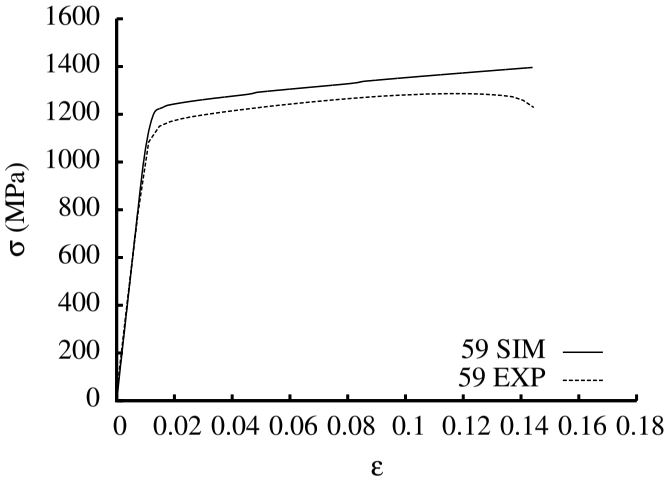
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



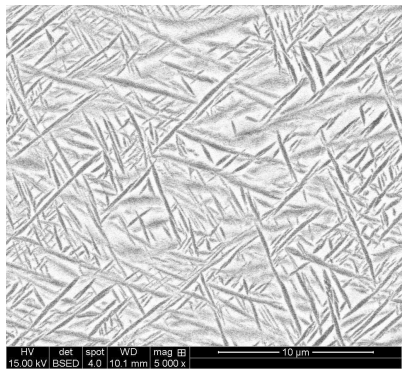
Traitement thermique : | 890°C - 30 min |, | Trempe jusqu'à 620°C |,| 620°C - 1h30 |, | 800°C - 4h |, | Trempe |, | 620°C - 2h |, | Trempe |.

B.2.17 Ti5553 59 [Settefrati, 2012]

Module d'Young	100.	GPa	f_α^N	49.5	%
Limite d'élasticité	1122	MPa	d_α^N	0.27	μm
Module EP	1260	MPa	Type	WI	



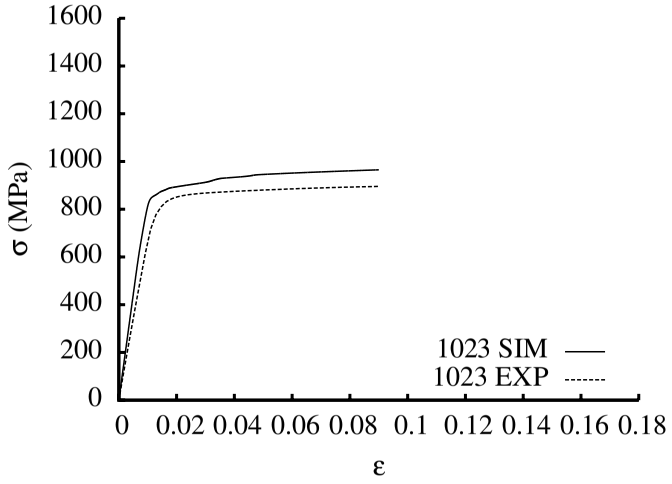
Traction $\dot{\varepsilon} = 2.10^{-03} s^{-1}$, Ø = 6 mm



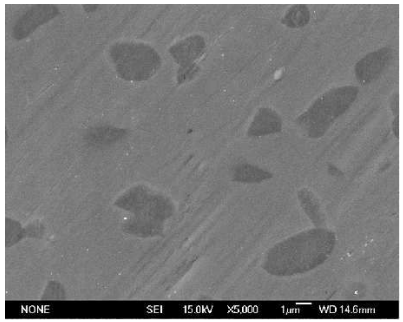
Traitement thermique : | 890°C - 30 min |, | Trempe |, | 620°C - 1h30 |, | Trempe |.

B.2.18 Ti1023 nodulaire

Module d'Young	62.5	GPa	f_α	25	%
Limite d'élasticité	750	MPa	d_α	2.5	μm
Module EP	621	MPa	Type	Nodules	



Traction $\dot{\varepsilon} = 1.10^{-04} s^{-1}$, Ø = 6 mm



Annexe C

Méthodes numériques d'intégration des équations différentielles

L'intégration de nos équations nécessite une discrétisation temporelle. On donne dans cette section un succinct rappel des deux solutions les plus communes : la méthode explicite de Runge-Kutta et les méthodes implicites du point milieu généralisé (θ-méthode).

C.1 Méthode de Runge-Kutta

Lorsque l'on cherche à intégrer numériquement des équations différentielles d'ordre supérieur à 1, on les transforme en équations différentielles d'ordre 1 par changement de variables, ce qui permet par exemple de faire un développement de Taylor à l'ordre 2 d'un vecteur $\{v\}$ contenant l'ensemble des équations différentielles d'ordre 1 :

$$\{v\}(t+\Delta t) = \{v\}(t) + \{\dot{v}\}(t,\{v\})\Delta t + \{\ddot{v}\}(t,\{v\})\frac{\Delta t^2}{2} + O(\Delta t^3) \tag{C.1}$$

Si on pose δv_1 comme étant la variation à l'instant t, et δv_2 celle à l'instant $t+\frac{\Delta t}{2}$, on peut réécrire l'équation précédente comme :

$$\{\delta v_1\} = \{\dot{v}\}(t,\{v\})\Delta t \tag{C.2}$$

$$\{\delta v_2\} = \{\dot{v}\}(t+\frac{\Delta t}{2},\{v\}(t)+\frac{1}{2}\{\delta v_1\})\Delta t \tag{C.3}$$

$$\{v\}(t+\Delta t) = \{v\}(t) + \{\delta v_2\} + O(\Delta t^3) \tag{C.4}$$

On obtient ainsi la méthode de résolution Runge-Kutta du second ordre. De la même manière, la méthode peut s'étendre à l'ordre 4 pour un traitement plus précis :

$$\{\delta v_1\} = \{\dot{v}\}(t,\{v\})\Delta t \tag{C.5}$$

$$\{\delta v_2\} = \{\dot{v}\}(t+\frac{\Delta t}{2},\{v\}+\frac{1}{2}\{\delta v_1\})\Delta t \tag{C.6}$$

$$\{\delta v_3\} = \{\dot{v}\}(t+\frac{\Delta t}{2},\{v\}+\frac{1}{2}\{\delta v_2\})\Delta t \tag{C.7}$$

$$\{\delta v_4\} = \{\dot{v}\}(t+\Delta t,\{v\}+\{\delta v_3\})\Delta t \tag{C.8}$$

$$\{v\}(t+\Delta t) = \{v\}(t) + \frac{1}{6}\{\delta v_1\} + \frac{1}{3}\{\delta v_2\} + \frac{1}{3}\{\delta v_3\} + \frac{1}{6}\{\delta v_4\} + O(\Delta t^5) \tag{C.9}$$

Pour une résolution plus efficace, la discrétisation de l'incrément de temps Δt peut se faire non pas de manière fixe, comme cela a été fait ci-dessus, mais en l'adaptant à l'évolution du vecteur solution $\{v\}$. Cette méthode est décrite par exemple dans [Besson *et al.*, 2001].

C.2 θ-méthodes

Ces méthodes sont basées sur le développement d'Euler, qui peut s'écrire :

$$\{v\}(t+\Delta t) = \{v\}(t) + \{\Delta v\} = \{v\}(t) + \{\dot{v}\}(t,\{v\})\Delta t \tag{C.10}$$

Le concept des θ-méthodes consiste alors à estimer la dérivée à un instant intermédiaire de l'incrément, caractérisé par un paramètre $\theta \in [0,1]$. Cela peut se faire de deux manières :

$$\{\Delta v\} = \{\dot{v}\}(t+\theta\Delta t,\{v\})\Delta t \qquad type1 \tag{C.11}$$

$$\{\Delta v\} = [(1-\theta)\{\dot{v}\}(t,\{v\}) + \theta\{\dot{v}\}(t+\Delta t,\{v\})]\Delta t \qquad type2 \tag{C.12}$$

Deux solutions sont donc possibles pour la discrétisation de l'incrément du vecteur $\{v\}$. On doit résoudre le système d'équations (C.11) ou (C.12) pour trouver $\{\Delta v\}$. Le vecteur des résidus $\{\Re\}$ s'écrit alors :

$$\{\Re\} = \{v\} - \{\dot{v}\}(t+\theta\Delta t,\{v\})\Delta t = \{0\} \qquad type1 \tag{C.13}$$

$$\{\Re\} = \{v\} - [(1-\theta)\{\dot{v}\}(t,\{v\}) + \theta\{\dot{v}\}(t+\Delta t,\{v\})]\Delta t = \{0\} \qquad type2 \tag{C.14}$$

On propose d'utiliser la méthode itérative de Newton pour résoudre le système d'équations non-linéaires :

$$\{\Re\}(\{\Delta v\}) = \sum_i \{\Re\}(\{\Delta v\}_i) + \frac{\partial\{\Re\}(\{\Delta v\}_i)}{\partial\{\Delta v\}}(\{\Delta v\} - \{\Delta v\}_i) \tag{C.15}$$

où $\dfrac{\partial\{\Re\}}{\partial\{\Delta v\}}$ représente le jacobien de l'équation. Il s'écrit :

$$[J] = [I] - \frac{\partial\{\dot{v}\}(t+\theta\Delta t)}{\partial\{\Delta v\}}\,\Delta t \qquad type1 \tag{C.16}$$

$$[J] = [I] - \theta\,\frac{\partial\{\dot{v}\}(t+\Delta t)}{\partial\{\Delta v\}}\,\Delta t \qquad type2 \tag{C.17}$$

Annexe D

Problème de l'inclusion dans un milieu homogène infini

On considère un milieu homogène infini (Ω) subissant une déformation uniforme, et perturbée par la présence d'une inclusion (ou d'une cavité). Si une déformation libre de contrainte, ε^L_{kl}, est imposée à l'inclusion, la loi de Hooke donne :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\left(\varepsilon_{kl} - \varepsilon^L_{kl}\right) = C_{ijkl}\left(u_{l,k} - \varepsilon^L_{kl}\right) \tag{D.1}$$

où $\underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}$ est le tenseur d'élasticité du milieu infini. En ne considérant pas les efforts volumiques, les équations d'équilibre s'écrivent :

$$\sigma_{ij,j} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl,j} - C_{ijkl}\varepsilon^L_{kl,j} = 0 \quad (i = 1,2,3) \tag{D.2}$$

La contribution de la déformation libre $\underset{\sim}{\varepsilon}^L$ aux équations d'équilibre est similaire à celle d'une force volumique. On peut alors faire le rapprochement avec le problème qui consiste à trouver le déplacement en un point x lorsqu'une force volumique $F\ (-C_{ijkl}\varepsilon^L_{kl,j})$ est appliquée en un autre point x'. La solution dépend alors uniquement de la distance entre ces deux points puisque le milieu est homogène et infini :

$$u_i(x) = u^0_i(x) - \int_\Omega G_{ij}(x-x')C_{jpkl}\varepsilon^L_{kl,p'}d\Omega' \tag{D.3}$$

où $\underset{\sim}{G}$ est le tenseur de Green, et u^0_i est le déplacement du milieu de référence dû aux conditions limites. Dans notre cas, le milieu se caractérise uniquement par un tenseur d'élasticité $\underset{\sim}{\underset{\sim}{C}}$ uniforme, en conséquence $u^0_i = 0$. L'équation (D.3) peut être développée pour obtenir :

$$u_i(x) = -\int_\Omega C_{jpkl}G_{ij}(x-x')\varepsilon^L_{kl}\ n_{p'}d\Omega' + \int_\Omega C_{jpkl}G_{ij,p'}(x-x')\varepsilon^L_{kl}d\Omega' \tag{D.4}$$

où $\{n\}$ est le vecteur unitaire normal à la surface du domaine Ω et orienté vers l'extérieur. Le premier terme de l'équation (D.4) est nul en l'absence de force de surface. Dans ces conditions, l'équation peut être simplifiée dans le cas où l'inclusion est ellipsoïdale (Fig.D.1) et la déformation libre est homogène [Mura, 1987]. Le déplacement de tout point à l'intérieur de l'ellipsoïde prend la forme suivante :

$$u_i(x) = \frac{1}{4\pi}C_{jlmn}\varepsilon^L_{nm}x_k\int_{-1}^{1}\int_0^{2\pi}\frac{\xi_k\xi_l N_{ij}(\{\xi\})}{D(\{\xi\})}d\theta d\zeta_3 \tag{D.5}$$

où $\{\xi\}$ est un vecteur d'onde introduit par le passage à la transformée de Fourier (cf. [Mura, 1987]). L'intégration volumique sur le milieu infini peut être réduite à une intégration

aux contours d'une sphère unitaire, définie par le vecteur unitaire $\{\zeta\}$. La position des points à l'intérieur de la sphère unitaire peut alors être décrite par le jeu de coordonnées ζ_3, θ (Fig.D.1). Les relations entre l'espace des $\{\xi\}$ et celui des $\{\zeta\}$ sont :

$$\xi_1 = \frac{\sqrt{1-\zeta_3^2}}{a_1}\cos\theta, \quad \xi_2 = \frac{\sqrt{1-\zeta_3^2}}{a_2}\sin\theta, \quad \xi_3 = \frac{\zeta_3}{a_3} \tag{D.6}$$

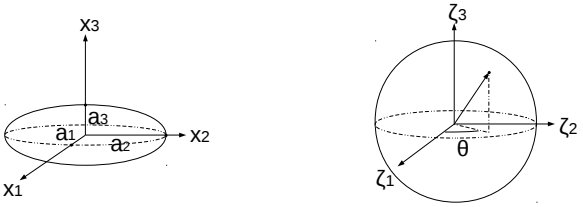


FIGURE D.1 – Sur la gauche, l'inclusion ellipsoïdale définie par les demi-axes a_1, a_2 et a_3. Sur la droite, la sphère unitaire équivalente au milieu homogène infini.

Dans l'équation (D.5), les constantes N_{ij} et D sont respectivement les cofacteurs et le déterminant du tenseur $\underset{\sim}{K}$:

$$K_{ik}(\{\xi\}) = C_{ijkl}\xi_j\xi_l \tag{D.7}$$

$$D(\{\xi\}) = \varepsilon_{mnl}K_{m1}K_{n2}K_{l3} \tag{D.8}$$

$$N_{ij}(\{\xi\}) = \frac{\varepsilon_{ikl}\varepsilon_{jmn}}{2}K_{km}K_{ln} \tag{D.9}$$

où ε_{ijk} est le symbole de Levi-Civita.

Eshelby [Eshelby, 1957] a proposé de relier la déformation totale à la déformation libre en faisant apparaître le tenseur d'Eshelby :

$$\underset{\sim}{\varepsilon} = \underset{\approx}{S} : \underset{\sim}{\varepsilon}^L \tag{D.10}$$

En reconsidérant l'équation (D.5), on peut facilement déduire l'expression générale du tenseur d'Eshelby :

$$S_{ijmn} = \frac{1}{8\pi}C_{pqmn}\int_{-1}^{1}\int_{0}^{2\pi}\left(\frac{\xi_j\xi_q N_{ip}(\{\xi\}) + \xi_i\xi_q N_{jp}(\{\xi\})}{D(\{\xi\})}\right)d\theta d\zeta_3 \tag{D.11}$$

$$= \int_{-1}^{1}\int_{0}^{2\pi} f(\theta,\zeta_3)\, d\theta d\zeta_3 \tag{D.12}$$

On trouve dans la littérature de nombreuses expressions analytiques du tenseur d'Eshelby pour certaines formes d'inclusions et pour des symétries particulières du tenseur d'élasticité $\underset{\approx}{C}$. Néanmoins, dans certains modèles d'homogénéisation on peut être amené à utiliser sa forme la plus générale. On propose donc de calculer numériquement cette double intégrale en utilisant la méthode du produit de deux intégrations unidimensionnelles. On choisit pour cela la méthode des quadratures de Gauss-Legendre :

$$S_{ijmn} = \sum_{k}^{N_k}\sum_{l}^{N_l} w_k w_l f(p_k,(1+p_l)\pi) \quad (0<w<1,\ -1<p<1) \tag{D.13}$$

Pour vérifier la précision de cette intégration numérique, plusieurs cas ont été étudiés en annexe E.2. Les résultats obtenus numériquement ont été comparés avec les formules analytiques données par la littérature.

Annexe E

Détermination du tenseur d'élasticité et du tenseur d'Eshelby

E.1 Relations entre constantes élastiques pour un matériau isotrope.

	$(E,\ \nu)$	$(k,\ \mu)$	$(C_{1111},\ C_{1122})$
E		$\frac{9k\mu}{3k+\mu}$	$\frac{(C_{1111}-C_{1122})(C_{1111}+2C_{1122})}{(C_{1111}+C_{1122})}$
ν		$\frac{3k-2\mu}{2(3k+\mu)}$	$\frac{C_{1122}}{(C_{1111}+C_{1122})}$
k	$\frac{E}{3(1-2\nu)}$		$\frac{C_{1111}+2C_{1122}}{3}$
μ	$\frac{E}{2(1+\nu)}$		$C_{1212}=\frac{C_{1111}-C_{1122}}{2}$
C_{1111}	$\frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)}$	$\frac{3k+4\mu}{3}$	
C_{1122}	$\frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}$	$\frac{3k-2\mu}{3}$	
α	$\frac{1+\nu}{3(1-\nu)}$	$\frac{3k}{3k+4\mu}$	$\frac{C_{1111}+2C_{1122}}{3C_{1111}}$
β	$\frac{2(4-5\nu)}{15(1-\nu)}$	$\frac{6(k+2\mu)}{5(3k+4\mu)}$	$\frac{8C_{1111}-2C_{1122}}{15C_{1111}}$

E.2 Calcul numérique du tenseur d'Eshelby : Exemples

E.2.1 Inclusion sphérique dans un milieu isotrope

Les calculs numériques de la double intégrale (D.13) se font avec 100 points d'intégration par intégrale.

Input :

```
****green
 ***elasticity
   *E 150.e+03
   *nu 0.3
  **isotropic
 ***ratio_a1a2 1.
 ***ratio_a3a2 1.
****return
```

Output :

$$\begin{pmatrix} 0.5238 & 0.04762 & 0.04762 & 0 & 0 & 0 \\ 0.04762 & 0.5238 & 0.04762 & 0 & 0 & 0 \\ 0.04762 & 0.04762 & 0.5238 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.2381 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.2381 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.2381 \end{pmatrix}$$

La solution analytique de S_{ijkl} peut être trouvé dans [Mura, 1987] :

$$\underset{\approx}{S} = \begin{pmatrix} S_{1111} & S_{1122} & S_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ S_{1122} & S_{1111} & S_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ S_{1122} & S_{1122} & S_{1111} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{2323} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{2323} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{2323} \end{pmatrix}$$

$$S_{1111} = \frac{7-5\nu}{15(1-\nu)}$$

$$S_{1122} = \frac{5\nu-1}{15(1-\nu)}$$

$$S_{2233} = \frac{4-5\nu}{15(1-\nu)}$$

Si on utilise ces expressions analytiques avec les constantes élastiques proposées, on obtient des résultats identiques à ceux calculés par intégration numérique.

E.2.2 Disque ($a_3 \to 0$) dans un milieu orthotrope

Input :

```
****green
 ***elasticity
   *C1111 200.e+03
   *C2222 220.e+03
   *C3333 190.e+03
   *C1122 120.e+03
   *C1133  80.e+03
   *C2233 110.e+03
   *C2323  60.e+03
   *C1212  50.e+03
   *C3131  40.e+03
  **orthotropic
 ***ratio_a1a2 1.
 ***ratio_a3a2 1.e-06
****return
```

Output :

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.4211 & 0.5789 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

La solution analytique pour S_{ijkl} ([Suvorov et Dvorak, 2002]) donne des résultats très proches de ceux proposés numériquement. On constate que le fait qu'un des demi-axes tende vers zéro n'affecte pas le calcul.

$$\underset{\approx}{S} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{C_{1133}}{C_{3333}} & \frac{C_{2233}}{C_{3333}} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

E.2.3 Cylindre infini ($\rho = \frac{a_1}{a_2} = 0.4,\ \ a_3 \to \infty$) dans un milieu isotrope transverse

Input :

```
****green
 ***elasticity
   *C1111 200.e+03
   *C3333 250.e+03
   *C1122 120.e+03
   *C1133  90.e+03
   *C2323  30.e+03
  **transversely_isotropic
 ***ratio_a1a2 0.4
 ***ratio_a3a2 1.e+06
****return
```

Output :

$$\begin{pmatrix} 0.8776 & 0.2653 & 0.3214 & 0 & 0 & 0 \\ 0.008163 & 0.449 & 0.1286 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.1429 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.3571 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.3367 \end{pmatrix}$$

Le calcul prend également bien en compte la condition $a_3 \to 0$ puisque la troisième ligne est nulle. Ce résultat et les valeurs numériques associées concordent parfaitement avec le résultat analytique proposé par [Suvorov et Dvorak, 2002].

$$S_{1111} = \frac{C_{1111}(2+3\rho)+C_{1122}\rho}{2C_{1111}(1+\rho)^2}$$

$$S_{2222} = \frac{\rho\,(C_{1111}(3+2\rho)+C_{1122})}{2C_{1111}(1+\rho)^2}$$

$$S_{1122} = \frac{C_{1122}(2+\rho)-C_{1111}\rho}{2C_{1111}(1+\rho)^2}$$

$$S_{2211} = \frac{\rho\,(C_{1122}(1+2\rho)-C_{1111})}{2C_{1111}(1+\rho)^2}$$

$$S_{1133} = \frac{C_{1133}}{(1+\rho)C_{1111}}$$

$$S_{3311} = \frac{\rho C_{1133}}{(1+\rho)C_{1111}}$$

$$S_{1212} = \frac{C_{1111}(1+\rho+\rho^2)-\rho C_{1122}}{2C_{1111}(1+\rho)^2}$$

$$S_{1313} = \frac{1}{2(1+\rho)}$$

$$S_{2323} = \frac{\rho}{2(1+\rho)}$$

E.3 Tenseur d'Eshelby dans le cas d'une inclusion aplatie ($a_3 << a_2 < a_1$) dans un HEM isotrope [Mura, 1987]

$$S_{iiii} = \frac{3}{8\pi(1-\nu)} a_i^2 I_{ii} + \frac{1-2\nu}{8\pi(1-\nu)} I_i \tag{E.6}$$

$$S_{iijj} = \frac{1}{8\pi(1-\nu)} a_i^2 I_{ji} - \frac{1-2\nu}{8\pi(1-\nu)} I_i \tag{E.7}$$

$$S_{ijij} = \frac{a_i^2 + a_j^2}{16\pi(1-\nu)} I_{ij} + \frac{1-2\nu}{16\pi(1-\nu)} (I_i + I_j) \tag{E.8}$$

$$S_{ijkl} = S_{iijk} = \cdots = 0 \tag{E.9}$$

$i,j,k,l \in \{1,2,3\};\ i \neq j \neq k \neq l$ Pas de sommation sur les indices.

Avec :

$$E(k) = \int_0^{\pi/2} \left(1 - \frac{(a_1^2 - a_2^2)}{a_1^2} \sin^2\phi\right)^{1/2} d\phi$$

$$F(k) = \int_0^{\pi/2} \left(1 - \frac{(a_1^2 - a_2^2)}{a_1^2} \sin^2\phi\right)^{-1/2} d\phi$$

$$I_1 = \frac{4\pi a_2 a_3 \left(F(k) - E(k)\right)}{a_1^2 - a_2^2} \qquad I_2 = \frac{4\pi a_3 E(k)}{a_2} - I_1$$

$$I_3 = 4\pi - \frac{4\pi a_3 E(k)}{a_2} \qquad I_{12} = \frac{I_2 - I_1}{a_1^2 - a_2^2}$$

$$I_{23} = \frac{I_3 - I_2}{a_2^2} \qquad I_{31} = \frac{I_3 - I_1}{a_1^2}$$

$$I_{11} = \frac{1}{3}\left(\frac{4\pi}{a_1^2} - I_{12} - I_{13}\right) \qquad I_{22} = \frac{1}{3}\left(\frac{4\pi}{a_2^2} - I_{12} - I_{23}\right)$$

$$I_{33} = \frac{1}{3}\frac{4\pi}{a_3^2}$$

Annexe F

Calcul des déformations plastiques lors d'un traitement thermique

F.1 Présentation du problème

Les observations au MET de la microstructure du Ti5553 MBD non déformé par [Escalé, 2012] mettent en évidence la présence d'un grand nombre de dislocations dans les nodules α, aux interfaces avec la matrice β (Fig.F.1).

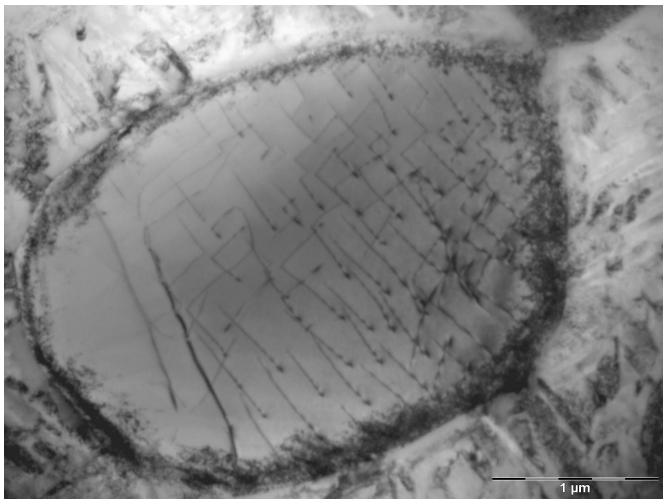


FIGURE F.1 – Nodule α après traitement thermique : une importante concentration de dislocations est visible à l'interface nodule / matrice. [Escalé, 2012].

On peut alors s'interroger sur l'origine de cette plasticité. L'étude menée par [Escalé, 2012] et [Settefrati, 2012] tend à montrer que c'est la différence des coefficients de dilatation entre les deux phases qui génère des contraintes suffisamment élevées pour faire apparaître de la plasticité localisée. Des calculs numériques peuvent permettre d'apporter des éléments supplémentaires pour étayer cette hypothèse.

On se concentrera ici uniquement sur le caractère anisotrope de la dilatation dans la phase α. Pour cela, une simulation d'un traitement thermique réalisé sur un agrégat composé de

100 grains monophasé α est proposé. Pour chaque grain, on attribue un comportement élasto-plastique 100% α (Tab.F.1, Tab.F.2) et une orientation cristallographique aléatoire. On considère les familles de systèmes de glissement basale, prismatique, pyramidale $< a >$ et pyramidale $< c+a >$. Du fait de l'absence de confinement au sein des grains α, les limites d'élasticité de chaque famille sont réduites par rapport à celles identifiées pour les aiguilles α du Ti5553 par exemple. Les équations définissant la loi de comportement en plasticité cristalline sont les suivantes :

$$\tau^s = \underset{\sim}{\sigma} : \underset{\sim}{m}^s \tag{F.1}$$

$$f^s(\tau^s, x^s, r^s) = \mid \tau^s - x^s \mid - \tau_c^s \tag{F.2}$$

$$x^s = c\alpha^s \eta^s \upsilon^s \tag{F.3}$$

$$\dot{\upsilon}^s = \left\langle \frac{f^s}{K} \right\rangle^n \tag{F.4}$$

La dilatation thermique de la phase hexagonale α est exprimée *via* le tenseur $\underset{\sim}{\alpha}$:

$$\underset{\sim}{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_a & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_a & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_c \end{pmatrix}$$

La déformation locale peut donc s'écrire :

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}} = \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^e + \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^p + \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{th} \tag{F.6}$$

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}} = \underset{\sim\sim}{C}^{-1} : \dot{\underset{\sim}{\sigma}} + \sum^s \dot{\upsilon}^s \eta^s \underset{\sim}{m}^s + \underset{\sim}{\alpha} \dot{T} \tag{F.7}$$

F.2 Evolution des propriétés mécaniques de la phase α avec la température

F.2.1 Elasticité

D'après la littérature, les constantes d'élasticité de la phase α varient peu en fonction de la température. Les mesures par résonance acoustique électromagnétique (méthode EMAR) faites par [Ogi *et al.*, 2004] sur des polycristaux de titane pur ont permis de suivre l'évolution de chaque constante d'élasticité avec la température (Fig.F.2).

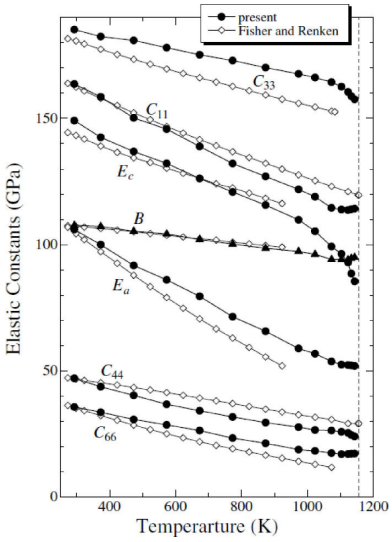


FIGURE F.2 – Évolution des constantes d'élasticité du monocristal α en fonction de la température [Ogi *et al.*, 2004].

On remarque que les valeurs mesurées dans ces travaux à température ambiante sont assez proches de celles proposées par d'autres auteurs [Brandes et Brook, 1992], [Petry *et al.*, 1991].

F.2.2 Viscoplasticité

La sensibilité à la vitesse m a été mesurée récemment dans le Ti5553 par [Clément, 2010] pour différentes températures (Fig.F.3). La constante n, que l'on cherche à déterminer pour notre loi de comportement, est simplement l'inverse de m.

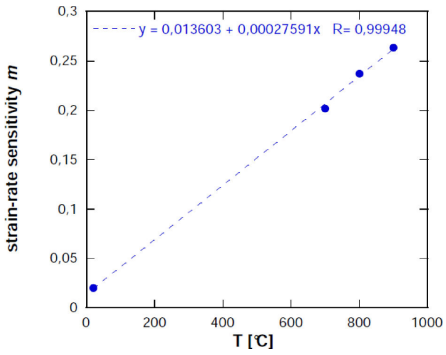


FIGURE F.3 – Évolution de la sensibilité à la vitesse en fonction de la température pour le Ti5553 [Clément, 2010].

Dans cette thèse [Clément, 2010], une évolution de la limite d'élasticité du Ti5553 est également proposée pour les hautes températures (Fig.F.4). A partir de ces essais, réalisés pour plusieurs vitesses, on peut se donner une idée de l'évolution de nos paramètres matériau. A l'échelle macroscopique, on peut écrire en première approximation dans le cas d'une traction uniaxiale :

$$\sigma_y = R_0 + K\dot{\varepsilon}^m \tag{F.8}$$

avec σ_y la limite d'élasticité macroscopique, et R_0 le seuil de plasticité. En connaissance des valeurs de m pour ces températures, on peut calculer celle de K à partir des essais réalisés

pour différentes vitesses (Fig.F.4), puis en déduire la valeur de R_0. On s'aperçoit qu'à 700°C la valeur de K est proche de 1000 MPa, soit près du double de sa valeur à température ambiante. Concernant R_0, sa valeur est très faible à haute température puisqu'on tend alors vers un comportement visqueux.

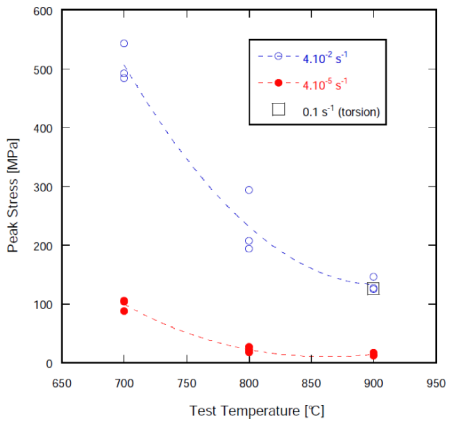


FIGURE F.4 – Évolution de la limite d'élasticité en fonction de la température pour le Ti5553 [Clément, 2010].

En s'appuyant sur cette étude et sur les paramètres matériau proposés pour la phase α du Ti5553 MBD en plasticité cristalline (Tab.3.6), on évalue les constantes pour la phase α monocristalline et leur évolution de 20°C à 880°C (Tab.F.1, Tab.F.2), que l'on considère ici simplement linéaire. On retire 150 MPa pour les cissions critiques résolues de chaque famille de systèmes de glissement, et on suppose que l'écrouissage est conservé.

	C_{1111}	C_{1122}	C_{1133}	C_{3333}	C_{2323}
20°C	168	95	69	191	48
880°C	118	88	63	155	30

TABLE F.1 – Valeurs des constantes élastiques de la phase α à 20°C et à 880°C. Ces constantes sont issues de [Ogi *et al.*, 2004].

	n		K (MPa.s^m)		τ_c^s (MPa)		c (MPa)	
	20°C	880°C	20°C	880°C	20°C	880°C	20°C	880°C
Basal $<a>$	30	5	270	540	65	10	300	300
Prismatic $<a>$	30	5	270	540	200	20	300	300
Pyramidal $<a>$	30	5	270	540	285	30	400	400
Pyramidal $<c+a>$	30	5	270	540	470	40	5000	5000

TABLE F.2 – Valeurs des paramètres viscoplastiques du monocristal α à 20°C et à 880°C.

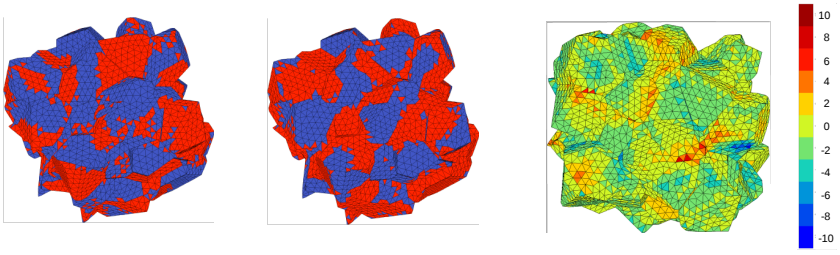
F.3 Evaluation des contraintes liées à la dilatation thermique de la phase α

Le calcul EF se fait sur un agrégat de 100 grains α de type Voronoï, avec des conditions périodiques au bord pour assurer la continuité (Fig.3.4). La température dans l'agrégat est supposée homogène. Un traitement thermique en deux cycles est proposé. Chaque cycle se compose d'un chauffage de 30s jusqu'à 880°C, puis d'une trempe de 2s pour obtenir des contraintes résiduelles, et enfin un cycle "normal" de chauffage-refroidissement (30s–30s). Ces temps de traitement, qui n'ont pas de sens du point de vue métallurgique, sont choisis pour simplifier la mise en donnée, et n'ont pas d'influence réelle sur les résultats du calcul, qui reste purement mécanique.

On considère dans un premier temps que l'évolution des coefficients de diffusion est la même pour le chauffage et le refroidissement : le coefficient associé au paramètre de maille a reste constant (10^{-6}) durant tout le traitement thermique, tandis que celui de l'axe c évolue linéairement de 8.10^{-6} (20°C) à 16.10^{-6} (880°C).

La différence de coefficients de dilatation entre l'axe c et le plan basal est responsable d'un effet de traction-compression dans le monocristal α. L'hexagone est en traction suivant l'axe c, puisque c'est le paramètre qui se dilate le plus lors du chauffage, tandis que la base se trouve en compression pour compenser. Dans le cas de l'agrégat, les interactions élastiques entre grains viennent perturber ce rapport de chargement, ce qui fait que le phénomène n'est plus visible (Fig.F.5). On peut également étudier la triaxialité des résultats, en faisant intervenir Γ, le rapport entre la trace du tenseur des contraintes et le critère de Mises :

$$\Gamma = \frac{Tr(\underset{\sim}{\sigma})}{\sqrt{\frac{3}{2}(\underset{\sim}{s} : \underset{\sim}{s})}} \tag{F.9}$$



σ_{22} σ_{33} Triaxialité (Γ)

FIGURE F.5 – Champ de contrainte locale suivant a (σ_{22}) et c (σ_{33}), la compression est en bleue et la traction en rouge. A gauche, indice de triaxialité dans le polycristal. Ces résultats sont obtenus pour une température de 880°C.

Lorsque l'on trace l'évolution de la plasticité (Fig.F.6), on constate que cette dernière est principalement portée par les systèmes pyramidaux $< c+a >$. Ces systèmes de glissement s'activent vers 800°C : à cette température les contraintes (de von Mises) sont proches de 300 MPa. Mais comme on peut le constater, la plasticité reste très restreinte. Ceci est dû au fait qu'à haute température, la résistance à la déformation est certes très faible mais les contraintes sont relaxées (Fig.F.7), tandis qu'à température ambiante, de fortes contraintes

résiduelles sont présentes, mais la résistance à la plasticité est plus élevée, l'amplitude des contraintes est alors insuffisante pour générer de la plasticité.

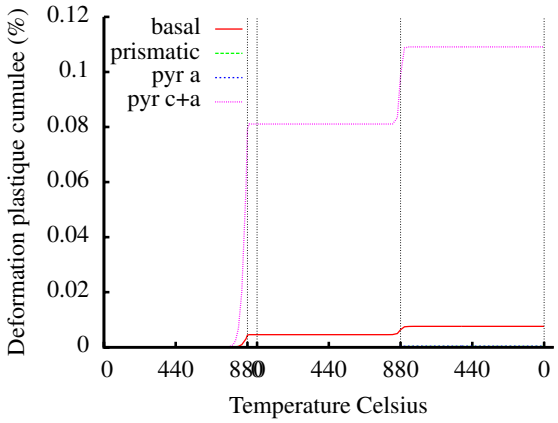


FIGURE F.6 – Evolution des déformations plastiques cumulées pour les quatre familles de systèmes de glissement de la phase α.

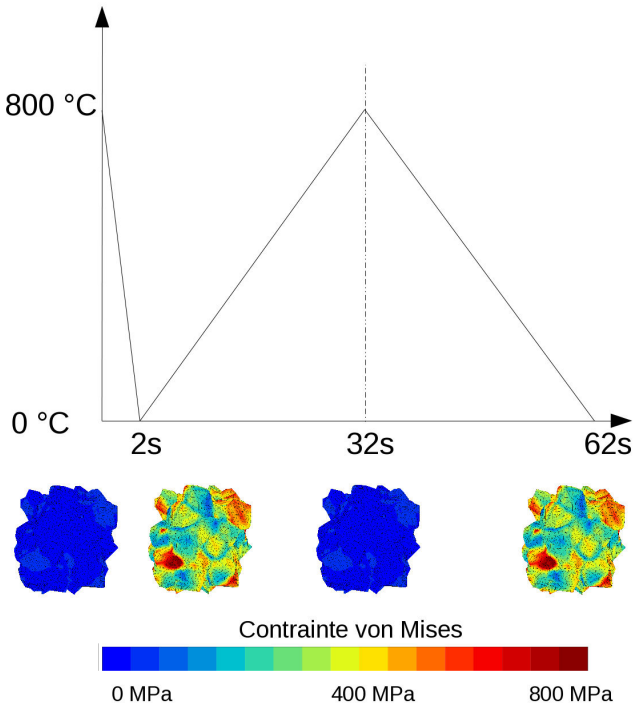


FIGURE F.7 – Evolution des contraintes von Mises lors du traitement thermique simulé.

F.4 Calcul des coefficients de dilatation de la phase α

Dans le but d'évaluer les coefficients de dilatation de la phase α, des travaux expérimentaux ont été menés dans le cadre du projet PROMITI par [Settefrati, 2012]. Les mesures faites en DRXHE à l'ESRF ont permis de suivre la variation des paramètres de maille en fonction de la température (Fig.F.8), et d'en déduire les coefficients de dilatation qui correspondent aux pentes des courbes obtenues.

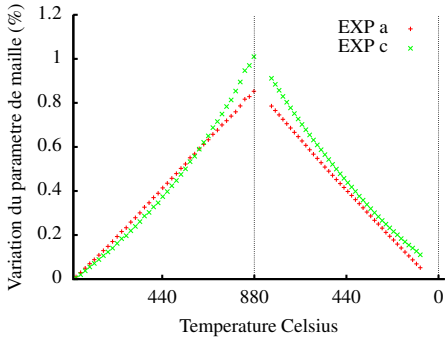


FIGURE F.8 – Variation relative des paramètres de maille mesurée expérimentalement par [Settefrati, 2012].

Mais la méthode reste délicate puisqu'elle ne donne accès qu'à des coefficients de dilatation apparents. En effet, les variations de paramètres de maille restent contraintes par les accommodations élastiques intergranulaires du polycristal. Les résultats obtenus ne sont donc pas directement représentatifs du monocristal α. A ce titre, le calcul EF peut permettre d'apporter des éléments de comparaison.

Pour cela, des courbes équivalentes peuvent être obtenues en simulation en retranchant les déformations plastiques aux déformations totales exprimées dans leur repère local. Si l'on compare notre résultat lors du deuxième cycle avec les variations des paramètres de maille mesurées expérimentalement, on s'aperçoit qu'il existe des différences (Fig.F.9). Du fait qu'on ait pris les mêmes coefficients de dilatation pour le chauffage et le refroidissement, les courbes simulées sont symétriques, ce qui n'est pas le cas expérimentalement.

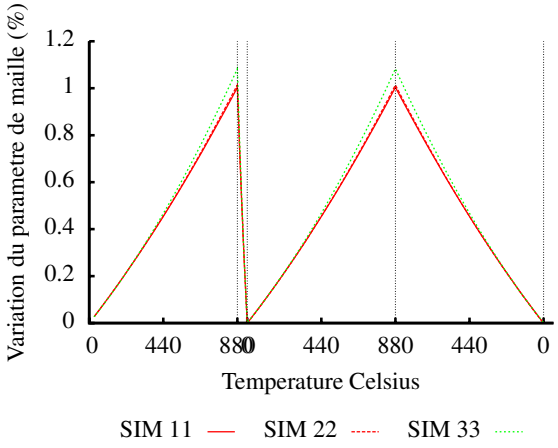


FIGURE F.9 – Simulation des variations de paramètre de maille de la phase α.

On va donc opter pour des coefficients de dilatation dont l'évolution va permettre de recaler les résultats expérimentaux présentés en figure F.8. Ces nouveaux résultats (Fig.F.10) sont obtenus avec des coefficients de dilatation qui représentent le comportement intrinsèque du monocristal α, et qui sont donc différents des coefficients "apparents" mesurés expérimentalement (Fig.F.11).

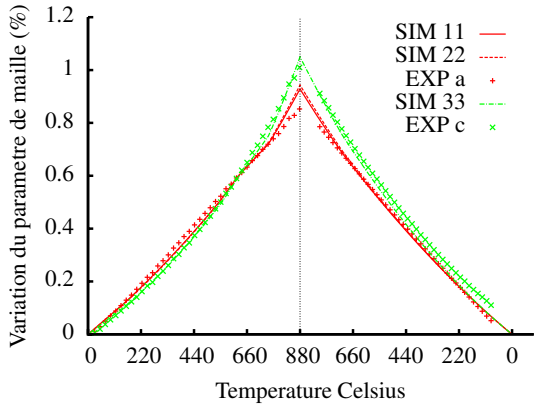


FIGURE F.10 – Simulation des variations de paramètre de maille de la phase α, et comparaison avec les mesures expérimentales.

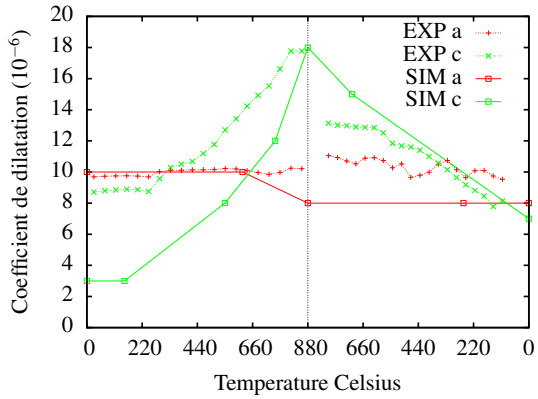


FIGURE F.11 – Evolution des coefficients de dilatation pour les paramètres a et c de la maille HCP lors du traitement thermique.

Simulation numérique multi-échelles du comportement mécanique des alliages de titane bêta-métastable Ti5553 et Ti17

Résumé : Le but de ce travail de thèse est de mieux comprendre les mécanismes de déformation à température ambiante dans les alliages de titane β-métastable Ti17 et Ti5553. Les microstructures étudiées sont composées de grains β transformé, dans lesquels la phase α peut précipiter, selon les relations de Burgers, sous la forme de douze variants différents. Une approche multi-échelles est donc préconisée avec trois niveaux représentatifs : macroscopique, mésoscopique (ex-grains β), et microscopique (variants α et matrice β de chaque grain). Différents modèles à champs moyens sont adaptés pour reproduire le comportement mécanique du Ti17 et du Ti5553. Ces modèles impliquent deux transitions d'échelle, et sont basés sur l'homogénéisation des comportements locaux, avec plusieurs manières de représenter les interactions intergranulaires. Les relations entre microstructures et propriétés mécaniques sont également considérées. Les modèles les plus complexes développés dans cette étude vont permettre de simuler l'anisotropie élastique et l'écoulement visqueux de chaque variant α (hcp) et de chaque matrice β (bcc), en employant la plasticité cristalline avec des écrouissages de type cinématique et isotrope. L'identification des paramètres matériaux est faite à partir d'une vaste base de données expérimentale provenant du projet PROMITI. Pour comprendre le rôle de chaque phase dans le processus de déformation, un calcul EF a également été fait afin de reproduire l'essai de traction sur une très fine éprouvette plate. Dans cette étude, le niveau mésoscopique est explicitement représenté en reprenant fidèlement la géométrie et l'orientation cristallographique de chaque grain β transformé. Des comparaisons entre expérience et simulation sont faites à l'échelle macroscopique pour les courbes σ–ε, ainsi qu'au niveau mésoscopique, en considérant les champs de déplacement hors-plan et les champs de déformation.

Mots clés : Alliages de titane beta-metastable, plasticité cyclique, approches multi-échelles, relations microstructures–propriétés.

Numerical multiscale simulation of the mechanical behavior of beta-metastable titanium alloys Ti5553 and Ti17

Abstract: The purpose of this PhD work is to investigate deformation mechanisms at room temperature in β-metastable titanium alloys Ti17 and Ti5553. Studied microstructures are composed of β-grains, in which α phase can precipitate under twelve different variants according to Burgers relationship. A multiscale approach is then proposed with three levels to consider: macroscopic, mesoscopic (prior β grains) and microscopic (α variants and β matrix of each grain). Different mean field models are adapted to depict Ti17 and Ti5553 mechanical behaviors. These models are based on the two scale-transition homogenization of local behaviors, with various ways of representing intergranular interactions. Relationships between microstructures and mechanical properties are also considered. The most advanced micromechanical models developed in this work depict elastic anisotropy and viscoplastic flow of each hcp α variant and each bcc β matrix, using crystal plasticity with kinematic and isotropic hardening. Identification of material parameters is done using a large experimental database from PROMITI project. To understand the role of each phase in the deformation process, a FE computation was also made to reproduce the uniaxial tensile test of a very thick micro-specimen. In this study, the mesoscopic scale is explicitly represented: each β grain has a real geometry and crystallographic orientation, according to a measured EBSD map in SEM. Comparisons between experiment and the numerical simulation are made on macroscopic σ–ε curves as well as on the mesoscopic scale, by considering out-of-plane displacement and strain fields.

Keywords: beta-metastable titanium alloys, Cyclic plasticity, Multiscale approaches, Microstructure - Mechanical properties relationship.

MINES ParisTech

ParisTech
INSTITUT DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES
PARIS INSTITUTE OF TECHNOLOGY