



HAL
open science

Influences des hétérogénéité élastoplastiques sur les contraintes du deuxième ordre dans les polycristaux métalliques mono- et biphasés : calculs autocohérents - mesures par diffraction X

Joël Krier

► **To cite this version:**

Joël Krier. Influences des hétérogénéité élastoplastiques sur les contraintes du deuxième ordre dans les polycristaux métalliques mono- et biphasés : calculs autocohérents - mesures par diffraction X. Matière Condensée [cond-mat]. Université Paul Verlaine - Metz, 1993. Français. NNT : 1993METZ005S . tel-01748952

HAL Id: tel-01748952

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01748952>

Submitted on 29 Mar 2018

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

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



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

Thèse

présentée pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université de METZ

- GENIE PHYSIQUE ET MECANIQUE

par

Joël KRIER

**INFLUENCES DES HETEROGENEITES ELASTOPLASTIQUES
SUR LES CONTRAINTES DU DEUXIEME ORDRE DANS LES
POLYCRISTAUX METALLIQUES MONO- ET POLYPHASES:
CALCULS AUTO-COHERENT - MESURES PAR DIFFRACTION X**

Soutenue le 13 janvier 1993 devant le jury composé de :

H. RUPPERSBERG Président
M. BERVEILLER Directeur de thèse
L. CASTEX Rapporteur
G. INGLEBERT Rapporteur
J.L. FERON Examineur
P. LIPINSKI Examineur

- Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux U.R.A. CNRS 1215 -
- Institut de Génie Mécanique et Productique -
Ile du Saulcy, 57045 METZ Cedex 01

Remerciements

Ce travail a été réalisé en collaboration entre le laboratoire de sciences des matériaux (Werkstoffwissenschaften-FB15) de l'université de Saarbrücken (Allemagne) et le Laboratoire de Physique et Mécanique de l'université de Metz et financé par une bourse de la Communauté Economique Européenne.

Je tiens à remercier MM. les Pr. M. Berveiller de l'université de Metz et H. Ruppertsberg de l'université de Saarbrücken pour avoir dirigé ce travail, pour la confiance et la patience qu'ils ont témoignés au cours de ces années.

Je remercie vivement les professeurs G. Inglebert, J.L. Castex et L. Feron pour l'intérêt qu'ils ont portés à ce travail en acceptant d'en être les rapporteurs et examinateurs.

J'adresse également mes plus vif remerciement à P. Lipinski pour son amitié, son soutien et pour les nombreux conseils qu'il a su prodiguer pendant ce travail.

Mes remerciements vont également à J. Gilgert qui a contribué à ce travail en effectuant les essais de traction et à tout les personnes de Metz et de Saarbrücken qui ont contribué directement ou indirectement et qui ont permis que cette étude ce déroule dans les meilleures conditions.

A mes parents

A Laurence

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE - METZ	
N° inv.	19930145
Cote	SI Mj 93/5
Loc	Magasin

<u>I. Introduction</u>	9
<u>II Mesures et calculs des déformations locales</u>	13
<u>II.1. Mesures des déformations élastiques par rayons X</u>	13
<u>II.2. Influences des hétérogénéités</u>	15
II.2.1. calcul des déformations locales	16
II.2.2. déformations élastiques	20
II.2.3. déformations inélastiques	22
II.2.4. résumé	23
<u>II.3. Schéma autocohérent élastoplastique</u>	24
II.3.1. comportement du monocristal	25
II.3.2. équation intégrale	26
II.3.3. solution autocohérente	27
<u>II.4. Applications</u>	28
II.4.1. comportement global	28
II.4.2. contraintes et déformations internes	34
II.4.3. énergie élastique	34
II.4.4. courbes $\varepsilon_{\varphi\Psi} = f (\sin^2 \Psi)$	36
<u>II.5. Conclusions</u>	37
<u>III Elasticité</u>	40
<u>III.1. Calcul autocohérent élastique</u>	40
<u>III.2. Polycristaux isotropes et macro-isotropes</u>	42
<u>III.3. Influence d'une texture cristallographique</u>	47
<u>III.4. Influence de la rotation propre, angle β</u>	51

<u>III.5. Influence d'une texture morphologique</u>	53
<u>III.6. Conclusions</u>	55
<u>IV Plasticité</u>	57
<u>IV.1. Les polycristaux monophasés</u>	59
IV.1.1. préparation des éprouvettes	60
IV.1.2. détermination des polycristaux modèles	61
IV.1.3. contraintes internes	66
IV.1.4. énergies bloquées	69
IV.1.5. déformations résiduelles	76
IV.1.5.1. mesures expérimentales	76
IV.1.5.2. calculs autocohérents	79
IV.1.6. Conclusions	86
<u>IV.2. Polycristaux biphasés</u>	87
IV.2.1. Biphasé hypoeutectique	87
IV.2.1.1. Calcul des contraintes internes	88
IV.2.1.2. calcul autocohérent	89
IV.2.1.3. contraintes dans la cémentite	90
IV.2.1.4. loi des $\sin^2\Psi$	92
IV.2.1.5. conclusions	94
IV.2.2. Influence des traitements de surface	94
IV.2.2.1. simulation du dédoublement	97
IV.2.2.2. composantes de déformation E_{i3}^P	98
IV.2.2.3. influence de la forme des constituants	104
IV.2.2.4. conclusions	108
<u>V. Conclusions</u>	110

Table des figures	113
Table des planches	117
Table des tableaux	118
Références bibliographiques	119
Annexe	122

Notations

. Nous réservons les lettres minuscules aux variables locales et les lettres majuscules pour les correspondants macroscopiques.

. La moyenne volumique d'une variable $f(x)$ est notée

$$\overline{f(x)} = \langle f(x) \rangle = \frac{1}{V_t} \int_{V_t} f(x) dV$$

. L'inverse est noté avec un exposant -1

. Les exposants (indices) suivants sont utilisés

- e pour définir la partie élastique
- i pour définir la partie inélastique
- p pour définir la partie plastique
- t pour définir les grandeurs totales (élastique+inélastique)
- {hkl} pour définir le plan réticulaire
- I pour indiquer la valeur locale dans un grain I
- M pour indiquer la valeur moyenne dans la matrice
- E pour indiquer la valeur dans l'ellipsoïde
- sc pour indiquer l'approximation autocohérente
- eff pour indiquer les propriétés effectives.

. les symboles suivants sont réservés pour :

A, A^I	l'opérateur de localisation du gradient de vitesse de déformation
B, B^I	l'opérateur de localisation du gradient de vitesse de contrainte
c, C	les constantes élastiques
E	le module d'Young
f	la fraction volumique des grains ou des phases
G	l'opérateur de Green
H^{gh}	la matrice d'écrouissage du monocristal
I	la matrice identité d'ordre 4
l, L	les modules tangents élastoplastiques
m^h	la direction de glissement du système h

n^h	la normale au plan de glissement du système h
N	le nombre de grains
R^h	la partie symétrique du facteur de Schmid
S^h	la partie antisymétrique du facteur de Schmid
s, S	les complaisances élastiques
T^{II}, T^{IJ}	les opérateurs d'interactions entre les inclusions
ε, E	les déformations locales et globales
ω	les rotations locales
$\dot{\varepsilon}, \dot{E}$	les taux de déformations locales et globales
σ, Σ	les contraintes locales et globales
$\dot{\sigma}, \dot{\Sigma}$	les taux de contraintes locales et globales

Chapitre I

I. Introduction

Introduction

Dans un matériau hétérogène, les contraintes locales actuelles dépendent de deux grandeurs indépendantes

- . le chargement “ extérieur “ surfacique ou volumique obtenu par des forces ou des déplacements imposés,
- . un champ de déformations inélastique (stress free strain au sens d'Eshelby) dont l'origine physique très variée (déformations plastiques, changement de phase, déformations thermiques, ...) peut également dépendre du chargement extérieur actuel.

Dans le cas d'un matériau élastique sans déformation inélastique, l'hétérogénéité du comportement est à l'origine de fluctuations des contraintes locales alors même que le chargement macroscopique produit des contraintes “ uniformes “ à une échelle grande par rapport aux fluctuations du champ local. Celles-ci ayant une cause structurale (polycristal, polyphasé, ...), les déformations inélastiques sont, dans beaucoup de cas, corrélées avec les hétérogénéités élastiques.

On constate donc que le concept de contraintes internes et résiduelles est directement relié à celui du comportement (élastique et inélastique) et à celui d'incompatibilité de la déformation inélastique. Il est normal d'aborder ce problème dans le cadre de la mécanique (ou micromécanique) des matériaux hétérogènes.

Les premiers travaux dans ce domaine ont cherché à relier les grandeurs locales aux grandeurs globales (Voigt [1], Reuss [2], Hill [3]), mais ce n'est qu'avec l'étude de “ l'hétérogénéité élémentaire “, dûe à Eshelby [4], que des progrès considérables ont été fait dans la compréhension des propriétés des matériaux hétérogènes.

Les problèmes de base sont les suivants

- analyse des contraintes, déformations, rotations élastiques (pour la formation de texture) dans le cas d'une inclusion inélastique considérée comme source élémentaire volumique de contraintes internes
- analyse des contraintes, déformations, rotations élastiques dans le cas d'une hétérogénéité (inclusion de caractéristiques mécaniques différentes de celles de la matrice).

La solution de ces problèmes est essentiellement utilisée dans deux optiques différentes

- la détermination des propriétés effectives des milieux
- la détermination des champs locaux (à l'intérieur du volume, et sur les interfaces) afin de prévoir l'amorçage de l'endommagement.

Bien que la solution self-consistante de Kröner [5] développée à partir de l'inclusion unique fournisse des valeurs exactes dans le cas du désordre parfait, il est indispensable de développer des études sur les hétérogénéités en ne se limitant pas à l'inclusion unique. Une voie générale et globale consiste à utiliser les fonctions de corrélation de Kröner [6] ; cette approche reste difficile à mettre en œuvre.

Le cadre général des transitions d'échelles pour les grandeurs microscopiques et macroscopiques a été discuté par Mandel [7]. Dans le cas de l'élasticité, Dederichs et Zeller [8] aborde le problème de la localisation cinématique en proposant une équation intégrale. Dans le cas des petites perturbations élastoplastiques, Berveiller et Zaoui [9] proposent une modification de cette équation qui est adaptée par Lipinski et Berveiller [10] aux grandes déformations élastoplastiques.

Le but de ce travail est de calculer l'évolution des contraintes internes et résiduelles dans les polycristaux métalliques microhétérogènes et de confronter ces résultats aux valeurs mesurées par diffraction des rayons X. Le chapitre II est consacré à l'étude du principe de cette méthode expérimentale et au rappel du formalisme micromécanique qui conduit aux contraintes (déformations) internes et résiduelles. Ce formalisme permet de visualiser l'influence des hétérogénéités élastiques et inélastiques sur les mesures par diffraction des rayons X.

Le chapitre III aborde l'étude en élasticité des contraintes et déformations locales dans les matériaux cubiques centrés (CC) et cubiques faces centrées (CFC). Le modèle autocohérent permet de mettre en évidence les contraintes d'ordre II et de dissocier l'influence d'une texture cristallographique et d'une texture morphologique sur le développement des contraintes locales.

Dans le chapitre IV, nous étudions les contraintes résiduelles dues aux hétérogénéités plastiques dans des matériaux cubiques centrés mono- et biphasés. Le premier paragraphe de ce chapitre est consacré à l'étude des contraintes résiduelles dans les polycristaux monophasés après une déformation plastique homogène en traction simple. Le calcul des contraintes résiduelles par le modèle autocohérent sera confronté à des mesures effectuées par diffraction des rayons X. Nous étudions également l'évolution des contraintes résiduelles en fonction de l'orientation cristallographique et de l'énergie élastique bloquée en fonction de la texture cristallographique. Le calcul des contraintes résiduelles dans un polycristal biphasé du type ferrite-cémentite après

déformation plastique en traction simple fait l'objet du deuxième paragraphe. Il permet de déterminer les contraintes résiduelles dans la phase cémentite très difficile à mesurer dans ces matériaux et également de comparer les effets des hétérogénéités plastiques dans un matériau monophasé et dans un matériau biphasé. Dans la dernière partie de ce chapitre, nous calculons les contraintes internes dans un matériau biphasé après traitement de surface (grenailage, rectification, tournage, ...) à l'aide de la solution du problème de l'inclusion d'Eshelby-Kröner. Ce modèle simple permet de reproduire de manière satisfaisante l'influence qualitative de ces opérations sur la mesure des contraintes par diffraction des rayons X. Nous montrons également comment une texture morphologique peut introduire les même effets sans cisaillement en surface. Nous étudions dans ce cas l'évolution des contraintes en fonction de l'orientation morphologique des constituants.

Chapitre II

II. Mesures et calculs des déformations locales

II.1. Mesure des déformations élastiques par rayons X.

II.2. influences des hétérogénéités

II.2.1. calculs des déformations locales

II.2.2. déformations élastiques

II.2.3. déformations inélastiques

II.2.4. résumé

II.3. Genèse des contraintes internes en élastoplasticité

II.3.1. comportement du monocristal

II.3.2. équation intégrale

II.3.3. solution autocohérente

II.4. Applications

II.4.1. comportement global

II.4.2. contraintes et déformations internes

II.4.3. énergie élastique

II.4.4. courbes $\varepsilon = f(\sin^2 \Psi)$

II.5. Conclusions

II. Mesures et calculs des déformations.

II.1. Mesure des déformations élastiques par rayons X

La mesure des déformations internes par diffraction des rayons X repose sur l'utilisation du réseau cristallin comme jauge de déformation. Cette méthode permet de déterminer la distance interréticulaire $d_{\{hkl\}}$ entre les plans cristallins $\{hkl\}$ à partir de la loi de Bragg, $n \lambda = 2 d \sin \theta$, dans le volume irradié (V_I), (λ longueur d'onde du rayonnement utilisé, θ angle de diffraction).

Dans le volume irradié seuls les plans en position de Bragg pourront diffracter et contribuer à la mesure de $d_{\{hkl\}}$. On voit apparaître la notion de volume diffractant (V_D) à l'intérieur du volume irradié. Cette notion est capitale pour la détermination des contraintes macroscopiques par cette méthode de mesure, figure II-1.

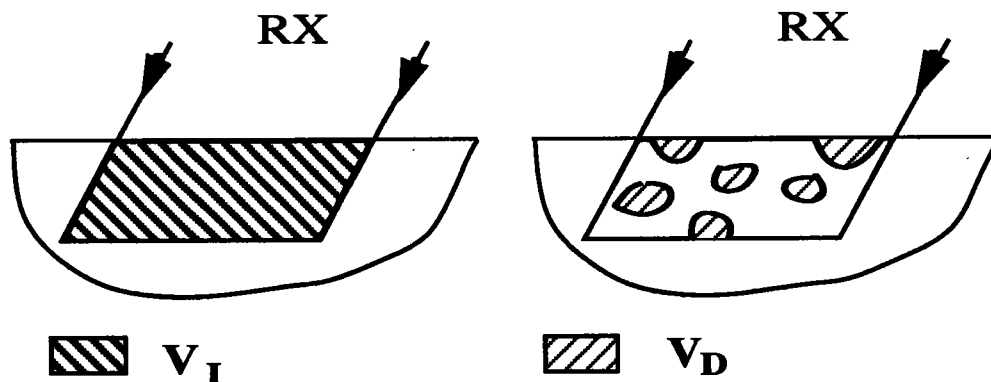


Figure II-1 : Mise en évidence des volumes irradiés V_I et diffractants V_D .

Pour tous les grains du volume diffractant, la mesure de $d_{\{hkl\}}$ s'effectue suivant la normale au plan de diffraction définie par \vec{N} , repérée dans le repère macroscopique lié à l'échantillon (1, 2, 3) par les angles φ et ψ , figure II-2; ψ est l'angle entre la normale à la surface de l'échantillon (3) et la direction de mesure \vec{N} , φ est l'angle entre la direction (1) et la projection de la direction de mesure dans le plan (1, 2).

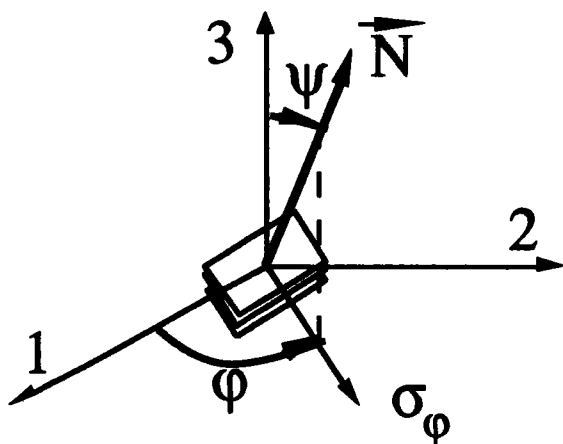


Figure II- 2 : Représentation de la direction de mesure dans le repère macroscopique.

Le vecteur \vec{N} s'exprime de la manière suivante

$$\vec{N} \begin{bmatrix} \sin \psi \cos \varphi \\ \sin \psi \sin \varphi \\ \cos \psi \end{bmatrix} \quad (\text{II-1})$$

La mesure de $d_{\{hkl\}}$ permet d'exprimer la déformation élastique $\epsilon_{\varphi\psi}$ suivant la normale \vec{N} en connaissant la distance interréticulaire d_0 du matériau non contraint.

$$\epsilon_{\varphi\psi}^{\{hkl\}} = \frac{d_{\{hkl\}} - d_0}{d_0} \quad (\text{II-2})$$

$d_{\{hkl\}}$ et $\epsilon_{\varphi\psi}^{\{hkl\}}$ représentent des valeurs moyennes sur le volume diffractant.

La déformation normale $\epsilon_{\varphi\psi}^{\{hkl\}}$ s'exprime en fonction du champ de déformation élastique $\epsilon_{ij}^e(\mathbf{r})$ en un point \mathbf{r} du volume diffractant par

$$\epsilon_{\varphi\psi}^{\{hkl\}} = \frac{1}{V_D} \int_{V_D} \epsilon_{ij}^e(\mathbf{r}) N_i N_j dV \quad (\text{II-3})$$

que l'on peut transformer à l'aide de la loi de Hooke en

$$\epsilon_{\varphi\psi}^{\{hkl\}} = \frac{1}{V_D} \int_{V_D} s_{ijkl}(\mathbf{r}) \sigma_{kl}(\mathbf{r}) N_i N_j dV \quad (\text{II-4})$$

où $s(\mathbf{r})$ sont les compliances élastiques locales et $\sigma(\mathbf{r})$ les contraintes locales.

Cette équation conduit, pour un état de contraintes supposé biaxial en surface ($\sigma_{i3} = 0$), pour un

comportement élastique homogène à la loi des $\sin^2\Psi$ [11] qui permet de déterminer la contrainte macroscopique dans la direction φ . La loi des $\sin^2\Psi$ s'exprime de la manière suivante

$$\varepsilon_{\varphi\Psi}^{\{hkl\}} = \frac{1}{2} S_2(hkl) \sigma_{\varphi} \sin^2\Psi + S_1(hkl) [\sigma_{11} + \sigma_{22}] \quad (\text{II-5})$$

avec, dans le repère principal $\sigma_{\varphi} = \sigma_{11} \cos^2\varphi + \sigma_{22} \sin^2\varphi$

et $1/2 S_2(hkl)$ et $S_1(hkl)$ sont les constantes élastiques radiocristallographiques (qui sont égales respectivement à $(1+\nu)/E$ et $-\nu/E$ pour un comportement élastique isotrope).

Cette loi linéaire en $\sin^2\Psi$ permet de déterminer le champ de contraintes macroscopique sous les conditions suivantes

- comportement macroscopique isotrope,
- comportement élastique local linéaire (loi de Hooke),
- l'état macroscopique des contraintes et des déformations doit être homogène dans le volume irradié,
- l'état de contraintes est supposé biaxial dans le volume irradié.

Les équations (II-3) et (II-4) montrent que les hétérogénéités du comportement élastique, des champs de contraintes et de déformations élastiques en fonction du volume diffractant peuvent introduire des écarts dans la loi des $\sin^2\Psi$.

II.2. Influences des hétérogénéités

Dans la présente partie, nous rappelons le cadre général découlant d'une résolution des problèmes de champs par une équation intégrale pour

- un milieu infini macrohomogène et microhétérogène
- un champ de déformation inélastique donné
- une hétérogénéité du comportement élastique $c(r)$ donné
- l'approximation des petites transformations.

Nous ne nous préoccupons pas ici de la genèse des déformations inélastiques qui, pour le cas de la

plasticité, sera décrite ultérieurement.

Par contre, nous proposons d'analyser de manière générale les effets des champs de déformations élastiques sur la mesure par diffraction des rayons X des déformations normales à des familles de plans $\{hkl\}$ qui conduit dans les cas simples, à la loi des $\sin^2\Psi$.

II.2.1. déformation totale locale

Nous considérons un milieu macrohomogène et microhétérogène pour lequel, dans l'état de référence les champs de contraintes et de déformations sont nuls. Dans l'état actuel, le chargement imposé provoque l'apparition de contraintes internes, $\sigma(r)$ et de déformations totales locales, $\varepsilon^t(r)$.

Ces dernières se composent de déformations élastiques locales $\varepsilon^e(r)$ et de déformations inélastiques locales $\varepsilon^{in}(r)$. Les déformations élastiques locales et les contraintes internes sont reliées par la loi de Hooke :

$$\sigma(r) = c(r) \varepsilon^e(r) \quad (\text{II-6})$$

Pour que le milieu ne perde pas sa compacité, il faut que le champ de déformation totale vérifie les équations de compatibilité. Il faut donc que le champ de déformation dérive d'un champ de déplacement $u^t(r)$

$$\varepsilon_{ij}^t(r) = \frac{1}{2} \left(u_{i,j}^t + u_{j,i}^t \right) \quad (\text{II-7})$$

Le champ de contraintes doit vérifier les conditions d'équilibre

$$\begin{aligned} & \text{- des moments : } \sigma_{ij} = \sigma_{ji} \\ & \text{- des forces : } \sigma_{ij,j} = 0 \\ & \text{- à la surface : } \sigma_{ij} n_j^S = T_i^S \end{aligned} \quad (\text{II-8})$$

avec \vec{n}^S vecteur normal unitaire extérieur à la surface S et \vec{T}^S le vecteur contrainte.

On pose $c(r) = C^0 + \delta c(r)$, où C^0 caractérise le comportement d'un milieu homogène.

La formulation générale de l'équation intégrale s'obtient pour un milieu infini homogène de constantes élastiques C^0 à partir des équations (II-6, II-7, II-8).

Elles permettent d'écrire

$$\left\{ \left[C_{ijkl}^0 + \delta c_{ijkl}(r) \right] \left[u_{k,l}^t(r) - \varepsilon_{kl}^{in}(r) \right] \right\}_{,j} = 0 \quad (\text{II-9})$$

cette équation peut se mettre sous la forme

$$C_{ijkl}^0 u_{k,lj}^t(r) + f_i = 0 \quad (\text{II-10})$$

avec $f_i = \left\{ \delta c_{ijkl}(r) u_{k,l}^t(r) - c_{ijkl}(r) \varepsilon_{kl}^{in}(r) \right\}_{,j}$

Le terme f_i peut être considéré comme une distribution fictive de forces volumiques. La résolution de cette équation s'effectue en utilisant la technique du tenseur de Green G du milieu infini homogène de constantes élastiques C^0 .

Le tenseur G est défini par

$$C_{ijkl}^0 G_{km,lj}(r-r') + \delta_{im} \delta(r-r') = 0 \quad (\text{II-11})$$

où δ_{im} est le tenseur de Kronecker,

$\delta(r-r')$ est la fonction de Dirac telle que, pour une fonction $f(r)$

$$\int_V f(r) \delta(r-r') dV = f(r) \quad (\text{II-12})$$

$G_{km}(r-r')$ représente le déplacement dans la direction de l'axe k au point r , lorsqu'une force unité $f_i = \delta_{im} \delta(r-r')$ est appliquée au point r' dans la direction de l'axe m .

Le déplacement total au point r est alors donné par

$$u_m(r) = u_m^0(r) + \int_V G_{mi}(r-r') \left[\delta c_{ijkl}(r') \varepsilon_{kl}^t(r') - c_{ijkl}(r') \varepsilon_{kl}^{in}(r') \right]_{,j} dV \quad (\text{II-13})$$

où u^0 est une solution de l'équation homogène associée.

La déformation totale s'obtient à partir du gradient du déplacement en intégrant par parties

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{mn}^t(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\varepsilon}_{mn}^o(\mathbf{r}) + \int_V \Gamma_{mnij}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \left[\delta c_{ijkl}(\mathbf{r}') \boldsymbol{\varepsilon}_{kl}^t(\mathbf{r}') - c_{ijkl}(\mathbf{r}') \boldsymbol{\varepsilon}_{kl}^{in}(\mathbf{r}') \right] dV \quad (\text{II-14})$$

$$\text{avec } \Gamma_{mnij}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{1}{2} \left\{ G_{mi,nj}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + G_{ni,mj}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \right\}$$

L'équation intégrale (II-14), appelée équation LSD par Kröner permet d'isoler les différentes sources d'hétérogénéités qui vont conduire à des champs de contraintes et de déformations microscopiques hétérogènes. Nous verrons à partir de cas simples l'influence de ces champs sur la mesure par diffraction des rayons X.

Relations grandeurs locales et grandeurs globales

De manière plus formelle, le champ de contraintes locales peut également s'exprimer de la manière suivante en fonction du chargement imposé, Σ .

$$\boldsymbol{\sigma}_{ij}(\mathbf{r}) = B_{ijkl}(\mathbf{r}) \Sigma_{kl} + \boldsymbol{\sigma}_{ij}^R(\mathbf{r}) \quad (\text{II-15})$$

où $B(\mathbf{r})$ représente le tenseur de localisation des contraintes macroscopiques et $\boldsymbol{\sigma}^R(\mathbf{r})$ sont les contraintes résiduelles dues aux incompatibilités de la déformation inélastique.

La forme duale s'obtient à partir de la loi de Hooke

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^e(\mathbf{r}) = s_{ijkl}(\mathbf{r}) B_{klmn}(\mathbf{r}) \Sigma_{mn} + s_{ijkl}(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma}_{kl}^R(\mathbf{r}) \quad (\text{II-16})$$

Le milieu est soumis à une déformation totale macroscopique E (contrainte macroscopique Σ).

Comme les chargements envisagés constituent des solutions uniformes $\boldsymbol{\varepsilon}^o$ pour des milieux homogènes, $\boldsymbol{\varepsilon}^o$ est égal à E^t et l'équation intégrale (II-14) devient

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{mn}^t(\mathbf{r}) = E_{mn}^t + \int_V \Gamma_{mnij}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \left[\delta c_{ijkl}(\mathbf{r}') \boldsymbol{\varepsilon}_{kl}^t(\mathbf{r}') - c_{ijkl}(\mathbf{r}') \boldsymbol{\varepsilon}_{kl}^{in}(\mathbf{r}') \right] dV \quad (\text{II-18})$$

L'approximation autocohérente à un site de cette équation consiste à ne prendre en compte que les interactions locales, sous la forme $\Gamma^1 \delta(r-r')$ [12], et de considérer les interactions non locales en remplaçant le comportement du milieu homogène C^0 par le comportement effectif C^{eff} .

En posant

$$\epsilon^{in}(r) = E^{in} + \delta\epsilon^{in}(r)$$

et en utilisant les propriétés du tenseur de Green $\int_V \Gamma C^0 E^{in} dV = 0$

la déformation totale s'écrit alors

$$\epsilon_{mn}^t(r) = E_{mn}^t + \Gamma_{mnij}^1(r) \left[\delta c_{ijkl}(r) \epsilon_{kl}^t(r) - c_{ijkl}(r) \delta\epsilon_{kl}^{in}(r) \right] \quad (II-19)$$

avec pour un comportement macroscopique isotrope

$$\Gamma_{ijkl}^1 = -\frac{1}{15\mu} \left[-\frac{3K + \mu}{3K + 4\mu} \delta_{ij} \delta_{kl} + 9 \frac{K + 2\mu}{3K + 4\mu} I_{ijkl} \right]$$

En utilisant le tenseur de localisation de la déformation totale, (II-19) devient

$$\epsilon_{ij}^t(r) = A_{ijmn}(r) E_{mn}^t - A_{ijmn}(r) \Gamma_{mnkl}^1(r) c_{klpq}(r) \delta\epsilon_{pq}^{in}(r) \quad (II-20)$$

$$\text{avec } A_{ijkl}(r) = \left[I_{ijkl} - \Gamma_{ijmn}^1(r) \delta c_{mnkl}(r) \right]^{-1}$$

L'équation (II-20) permet de donner les déformations internes sous la forme

$$\epsilon_{ij}^t(r) = A_{ijmn}(r) E_{mn}^t - a_{ijmn}(r) \delta\epsilon_{mn}^{in}(r) \quad (II-21)$$

$$\text{avec } a_{ijkl}(r) = A_{ijpq}(r) \Gamma_{pqmn}^1(r) c_{mnkl}(r)$$

Après décharge, $E^e=0$, les déformations élastiques résiduelles sont

$$\varepsilon_{ij}^e(\mathbf{r}) = A_{ijmn}(\mathbf{r}) E_{mn}^{\text{in}} - a_{ijmn}(\mathbf{r}) \delta\varepsilon_{mn}^{\text{in}}(\mathbf{r}) \quad (\text{II-22})$$

L'équation (II-21) permet de localiser les sources d'hétérogénéités et les écarts qu'elles provoquent sur la loi des $\sin^2\Psi$ à partir de cas particuliers.

II.2.2. déformation élastique

milieu homogène

Nous considérons tout d'abord que le comportement élastique est microhomogène, $\delta c(\mathbf{r}) = 0$, et que les déformations restent dans le domaine élastique. L'équation (II-21) se résume à

$$\varepsilon_{ij}^e(\mathbf{r}) = E_{ij} \quad (\text{II-23})$$

Les déformations élastiques sont homogènes et égales aux déformations imposées, il en est de même des contraintes. Elles sont homogènes sur tout le volume et prennent le nom de contraintes d'ordre I, $\sigma^{(I)}$.

La déformation normale mesurée par diffraction des rayons X, $\varepsilon_{\varphi\Psi}$ est alors

$$\varepsilon_{\varphi\Psi} = E_{ij} N_i N_j = s_{ijkl} \Sigma_{kl} N_i N_j \quad (\text{II-24})$$

où s représente les constantes élastiques du milieu.

Le développement de cette équation pour un état de contraintes biaxial conduit directement à la loi des $\sin^2\Psi$. Pour un milieu isotrope, les constantes élastiques radiocristallographiques sont

$$\frac{1}{2} S_2 = \frac{1}{2} S_{44} \quad \text{et} \quad S_1 = S_{12} \quad (\text{II-25})$$

milieu microhétérogène

Nous considérons à présent un milieu au comportement élastique microhétérogène pour lequel

l'équation intégrale (II-18) devient

$$\varepsilon_{ij}^e(\mathbf{r}) = A_{ijmn}(\mathbf{r}) E_{mn}^e \quad (\text{II-26})$$

avec

$$A_{ijkl}(\mathbf{r}) = \left[I_{ijkl} - \Gamma_{ijmn}^1(\mathbf{r}) \delta c_{mnkl}(\mathbf{r}) \right]^{-1}$$

Dans cette équation les hétérogénéités sont introduites par le tenseur de localisation de la déformation élastique $A(\mathbf{r})$:

- l'hétérogénéité élastique est introduite par le terme $\delta c(\mathbf{r})$ qui peut provenir de la désorientation relative des grains et de comportements élastiques différents dans chaque phase.
- la morphologie des constituants induit des hétérogénéités au niveau des interactions locales qui sont introduites par le terme $\Gamma^1(\mathbf{r})$.

Toutes ces hétérogénéités créent des fluctuations du champ de déformations élastiques par rapport au champ macroscopique homogène qui conduisent aux contraintes d'ordre II, $\sigma^{(II)}$.

L'équation (II-26) conduit à la déformation normale $\varepsilon_{\varphi\psi}$

$$\varepsilon_{\varphi\psi} = \frac{1}{V_D} E_{kl} N_i N_j \int_{V_D} A_{ijkl}(\mathbf{r}) dV \quad (\text{II-27})$$

matériau non texturé

L'orientation aléatoire des grains confère au polycristal un comportement macroscopique isotrope. Si les volumes diffractants sont suffisamment importants, on peut supposer qu'ils sont également isotropes ; la moyenne des tenseurs de localisation sur le volume diffractant est dans ce cas égale au tenseur identité. Les fluctuations sont nulles en moyenne et on retrouve un comportement linéaire de la loi des $\sin^2\psi$. Les constantes élastiques radiocristallographiques dépendent de l'anisotropie monocristalline et produisent des pentes différentes pour chaque famille de plans $\{hkl\}$ d'investigation. Pour un polycristal polyphasé, ces remarques sont valables individuellement pour chaque phase ; les contraintes d'ordre II seront spécifiques à chaque phase et le comportement sera linéaire pour chacune d'elles. La pente des droites permettra de déterminer les contraintes dans chaque phase.

matériau texturé

Les orientations préférentielles d'une texture cristallographique rompent l'isotropie macroscopique. De ce fait la moyenne des tenseurs de localisation dans les volumes diffractants n'est plus égale au tenseur identité et nous observons des écarts de linéarité dans la loi des $\sin^2\Psi$. De même une texture morphologique induit des hétérogénéités au niveau de l'interaction entre les grains et des écarts dans la loi des $\sin^2\Psi$. Il est dans ce cas impératif de prendre en compte l'influence de ces textures pour dépouiller les courbes de déformations sous peine de déterminer des contraintes fausses.

II.2.3. influence de l'hétérogénéité des déformations inélastiques

milieu microhomogène

Nous revenons maintenant à un milieu microhomogène, $\delta c(r) = 0$, soumis à une déformation totale E^t , composée d'une partie élastique E^e et d'une partie inélastique E^{in} .

L'expression des déformations internes (II-21) devient

$$\varepsilon_{ij}^e(r) = E_{ij}^t - a_{ijmn}(r) \delta\varepsilon_{mn}^{in}(r) \quad (\text{II-28})$$

avec $a(r) = \Gamma^1(r) c(r)$

soit après décharge

$$\varepsilon_{ij}^e(r) = E_{ij}^{in} - a_{ijmn}(r) \delta\varepsilon_{mn}^{in}(r) \quad (\text{II-29})$$

Ces déformations élastiques résiduelles conduisent à $\varepsilon_{\varphi\Psi}$

$$\varepsilon_{\varphi\Psi} = \frac{1}{V_D} N_i N_j \left[E_{ij}^{in} - \int_{V_D} a_{ijkl}(r) \delta\varepsilon_{kl}^{in}(r) dV \right] \quad (\text{II-30})$$

Pour un polycristal composé de grains sphériques ($a(r)$ homogène), seules les hétérogénéités de la déformation inélastique provoquent des écarts dans la loi des $\sin^2\Psi$. Pour une forme de grain différente les interactions entre grains induisent des hétérogénéités élastiques supplémentaires.

milieu microhétérogène

Dans un matériau microhétérogène, les déformations élastiques internes deviennent

$$\varepsilon_{ij}^t(\mathbf{r}) = A_{ijmn}(\mathbf{r}) E_{mn}^t - a_{ijmn}(\mathbf{r}) \delta\varepsilon_{mn}^{in}(\mathbf{r}) \quad (\text{III-31})$$

$$\text{avec } a(\mathbf{r}) = A(\mathbf{r}) \Gamma^1(\mathbf{r}) c(\mathbf{r})$$

Cette équation montre que les hétérogénéités élastiques et inélastiques se superposent pour donner naissance à un champ de déformations élastiques (contraintes) internes fortement hétérogène.

Après décharge les déformations élastiques résiduelles s'écrivent (II-22)

$$\varepsilon_{ij}^e(\mathbf{r}) = A_{ijmn}(\mathbf{r}) E_{mn}^{in} - a_{ijmn}(\mathbf{r}) \delta\varepsilon_{mn}^{in}(\mathbf{r}) \quad (\text{II-32})$$

Si le milieu est parfaitement désordonné et composé de grains sphériques, les hétérogénéités du champ de déformations élastiques résiduelles ne proviennent que des déformations inélastiques. Dans le cas contraire, introduction de textures cristallographiques et/ou morphologiques, les écarts dans la loi des $\sin^2\Psi$ sont liés aux hétérogénéités de $A(\mathbf{r})$, $a(\mathbf{r})$ et $\delta\varepsilon^{in}(\mathbf{r})$. Les hétérogénéités d'origine élastique et inélastique sont étroitement corrélées.

hétérogénéités intragranulaires

Les déformations inélastiques ne sont en général pas homogènes à l'intérieur des constituants d'un polycristal. Qu'il s'agisse de déformations plastiques par glissement, par maclage ou d'autres modes de déformations uniques ou combinés, tous les obstacles comme impuretés, inclusions ou même dislocations créent des champs de déformations élastiques locaux dont l'échelle est très inférieure à la taille des grains. Ces obstacles donnent naissance à des contraintes d'ordre III qui participe au champ de contrainte moyen d'ordre II homogène dans un grain. Les trois ordres de contraintes peuvent être représentés par la figure II-3.

II.2.4. Résumé

Pour isoler les sources d'hétérogénéités élastiques et inélastiques, nous avons développé l'équation intégrale dans le cas des petites perturbations en dissociant élasticité et inélasticité. Le problème principal de la détermination des grandeurs locales réside dans le calcul des tenseurs de localisation $A(\mathbf{r})$ de la déformation totale et des champs locaux de déformations inélastiques.

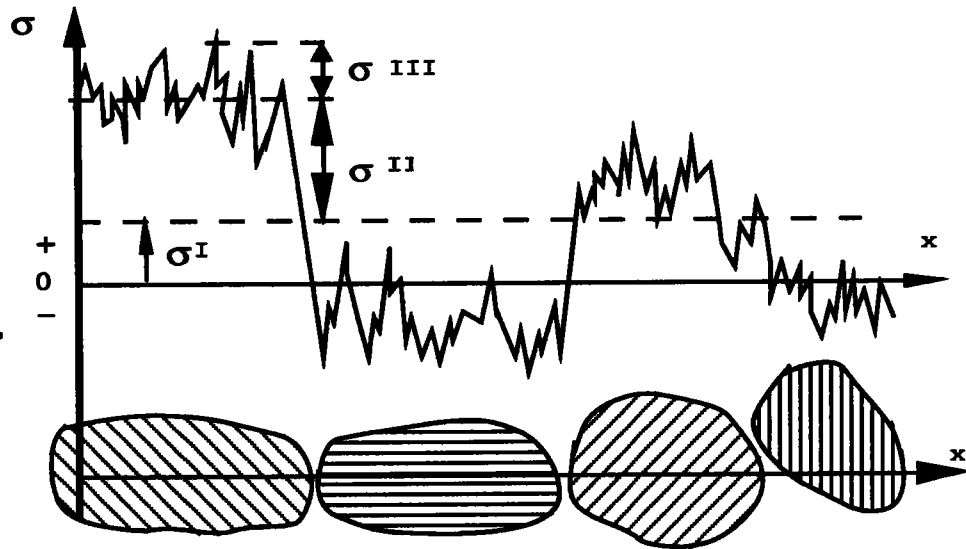


Figure II-3 : Superposition des contraintes internes de types I, II et III sur un domaine couvrant plusieurs grains [50].

II.3. calcul des déformations locales en élastoplasticité

Nous ne considérons dans la suite de cette étude que les déformations plastiques liées aux glissements cristallographiques. Ce mode de déformations est prépondérant en déformation à froid des métaux.

Pour résoudre les problèmes de localisation dans le cas des grandes déformations et décrire la réponse locale du polycristal microhétérogène à un chargement donné, il est nécessaire

- de considérer le comportement élastoplastique du milieu et le caractère incrémental de la déformation plastique,
- de connaître le comportement élastoplastique du monocristal,
- de décrire la microstructure de l'agrégat polycristallin,
- de prendre en compte les conditions d'équilibre et de compatibilité.

En négligeant le caractère visqueux du comportement (à froid), le paramètre temps qui intervient dans les relations constitue une variable utile pour la description des grandeurs physiques et mécaniques, mais ne correspond pas forcément au temps physique.

Nous développons ici le comportement du monocristal et l'approximation autocohérente de manière rapide. Pour de plus amples informations, nous renvoyons le lecteur à l'article de référence sur ce sujet [13].

II.3.1. comportement élastoplastique du monocristal

Lorsque le mécanisme de déformation plastique résulte du glissement plastique cristallographique (on exclut les autres formes de déformations anélastiques), la vitesse de rotation plastique $\dot{\omega}^p$ et la vitesse de déformation plastique $\dot{\epsilon}^p$ sont reliées à la vitesse de glissement plastique $\dot{\gamma}^p$ sur les systèmes de glissement de normale n_i^g et de direction m_i^g par les relations

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = \sum_g R_{ij}^g \dot{\gamma}^g \quad \text{et} \quad \dot{\omega}_{ij}^p = \sum_g S_{ij}^g \dot{\gamma}^g \quad (\text{II-28})$$

$$\text{avec} \quad R_{ij}^g = \frac{1}{2} (m_i^g n_j^g + m_j^g n_i^g) \quad \text{et} \quad S_{ij}^g = \frac{1}{2} (m_i^g n_j^g - m_j^g n_i^g)$$

La vitesse de la cission réduite $\dot{\tau}^g$ sur le système g est reliée à la vitesse des contraintes $\dot{\sigma}_{ij}$ par la relation

$$\dot{\tau}^g = R_{ij}^g \dot{\sigma}_{ij} \quad (\text{II-29})$$

L'écouissage du monocristal peut être décrit par la matrice d'écouissage H^{gh} reliant la vitesse de la cission critique $\dot{\tau}_c^g$ sur le système g à la vitesse de glissement plastique $\dot{\gamma}^h$ sur le système h telle que

$$\dot{\tau}_c^g = \sum_h H^{gh} \dot{\gamma}^h \quad (\text{II-30})$$

En combinant ces équations et en utilisant la loi linéaire, $\dot{\epsilon}_{ij} = s_{ijkl} \dot{\sigma}_{kl}$ pour la partie élastique de la déformation totale, $\dot{\epsilon}_{ij} = \dot{\epsilon}_{ij}^p + \dot{\epsilon}_{ij}^e$, on a

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \left(s_{ijkl} + \sum_{g,h} R_{ij}^g K^{gh} R_{kl}^h \right) \dot{\sigma}_{kl} \quad (\text{II-31})$$

où $K = H^{-1}$ pour les systèmes actifs

$$\text{soit} \quad \dot{\sigma}_{kl}(r) = l_{ijkl}(r) \dot{\epsilon}_{ij}(r) \quad (\text{II-32})$$

D'apparence simple, le tenseur l_{ijkl} est en fait très complexe et dépend de l'état de contrainte (loi de Schmid), de la nature des systèmes de glissement actifs et de toute l'histoire du chargement (cissions critiques et orientation du cristal).

II.3.2. équation intégrale

Le polycristal est supposé microhétérogène et macrohomogène et soumis sur sa frontière à une vitesse de déformation \dot{E} .

En un point r du solide, la vitesse de la déformation totale $\dot{\epsilon}(r)$ est reliée à la vitesse des contraintes $\dot{\sigma}(r)$ par la loi locale élastoplastique $\dot{\sigma}(r) = l(r) \dot{\epsilon}(r)$. Les champs $\dot{\sigma}(r)$ et $\dot{\epsilon}(r)$ doivent vérifier les relations de compatibilité et d'équilibre

$$\dot{\epsilon}(r) = \frac{1}{2} \left(\dot{u}_{i,j} + \dot{u}_{j,i} \right) \quad (\text{II-33})$$

$$\dot{\sigma}_{ij,j} = 0 \quad (\text{II-34})$$

où \dot{u} est la vitesse en un point r .

Afin de relier le champ $\dot{\epsilon}(r)$ à la vitesse de déformation \dot{E} , imposée sur la frontière, on introduit un milieu homogène fictif de modules élastoplastiques tangents L^0 tel que

$$l(r) = L^0 + \delta l(r) \quad (\text{II-35})$$

En éliminant $\dot{\epsilon}(r)$ et $\dot{\sigma}(r)$ entre les équations (II-32, II-33, II-34) et en utilisant (II-35), on aboutit à

$$L^0_{ijkl} \dot{u}_{k,lj} + \left(\delta l_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl} \right)_{,j} = 0$$

qui peut être transformée en équation intégrale pour $\dot{\epsilon}(r)$

$$\dot{\epsilon}_{ij}(r) = \dot{E}_{ij} + \int_V \Gamma_{ijkl}(r-r') \delta l_{ijkl}(r') \dot{\epsilon}_{mn}(r') dV' \quad (\text{II-36})$$

Γ_{ijkl} est le tenseur de Green modifié du milieu infini de module L^0_{ijkl} . Il se déduit du tenseur de

Green usuel par la relation

$$\Gamma_{ijkl} = \frac{1}{2} \left(G_{ik,jl} + G_{jk,il} \right) \quad (\text{II-37})$$

Dans [13], Berveiller et al. proposent une méthode autocohérente pour la résolution de l'équation intégrale (II-36).

II.3.3. Solution autocohérente

On suppose que le polycristal est constitué d'un grand nombre de grains dont le comportement est uniforme ainsi que la vitesse de déformation.

Le champ $\dot{\varepsilon}(\mathbf{r})$ dans le grain I s'exprime alors sous la forme

$$\dot{\varepsilon}(\mathbf{r}) = \sum_I \dot{\varepsilon}^I \Theta^I(\mathbf{r}) \quad (\text{II-38})$$

de même :

$$\delta l(\mathbf{r}) = \sum_I \Delta l^I \Theta^I(\mathbf{r}) \quad \text{où } \theta^I(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \text{si } \mathbf{r} \notin V^I \\ 1 & \text{si } \mathbf{r} \in V^I \end{cases} \quad (\text{II-39})$$

soit en tenant compte de (II-36, II-37, II-39)

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^I = E_{ij}^I + \sum_J T_{ijkl}^{IJ} \Delta l_{ijkl}^J \dot{\varepsilon}_{mn}^J \quad (\text{II-40})$$

La sommation sur J dans (II-40) est découplée en séparant l'effet du grain I sur lui-même des interactions entre grains différents J.

Tous les grains J représentent alors, pour le grain I, l'ensemble du polycristal que l'on peut décrire par l'intermédiaire d'un milieu homogène de modules tangents L^{eff} , qui sont les modules tangents effectifs du polycristal. A condition de considérer le comportement effectif du milieu, on peut remplacer (II-40) par l'équation

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^I = E_{ij}^I + T_{ijkl}^{II} \Delta l_{klmn}^I \dot{\varepsilon}_{mn}^I \quad (\text{II-41})$$

qui relie la vitesse de déformation locale dans le grain I à la vitesse $\dot{\mathbf{E}}$ imposée sur la frontière. Il est alors facile de déterminer le tenseur de localisation cinématique \mathbf{A}^I de la formation globale pour le grain I à partir de l'équation

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{ij}^I = \left(\mathbf{I}_{ijkl} - \mathbf{T}_{ijmn}^{\text{II}} \Delta \mathbf{l}_{mnkl}^I \right)^{-1} \dot{\mathbf{E}}_{kl} \quad (\text{II-42})$$

sous la forme

$$\mathbf{A}_{ijkl}^I(\mathbf{r}) = \left(\mathbf{I}_{ijkl} - \mathbf{T}_{ijmn}^{\text{II}} \Delta \mathbf{l}_{mnkl}^I \right)^{-1} \quad (\text{II-43})$$

Pour les contraintes $\dot{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{r})$, on a

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}}^I = \mathbf{l}_{ijkl}^I \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^I = \mathbf{l}_{ijkl}^I \left(\mathbf{I}_{klpq} - \mathbf{T}_{klmn}^{\text{II}} \Delta \mathbf{l}_{mnpq}^I \right)^{-1} \dot{\mathbf{E}}_{pq} \quad (\text{II-44})$$

et puisque la moyenne sur tous les grains I du taux de contrainte égale le taux de contrainte

imposé : $\dot{\boldsymbol{\Sigma}} = \overline{\dot{\boldsymbol{\sigma}}^I}$, il vient

$$\dot{\boldsymbol{\Sigma}} = \mathbf{L} \dot{\mathbf{E}} = \overline{\mathbf{l}^I \left(\mathbf{I} - \mathbf{T}^{\text{II}} \Delta \mathbf{l}^I \right)^{-1}} \dot{\mathbf{E}} \quad (\text{II-45})$$

où \mathbf{l}_{ijkl} est le tenseur identité d'ordre 4 et L le tenseur des modules tangents élastoplastiques effectifs du polycristal.

Des équations analogues à la localisation cinématique (II-42) ont été démontrées [13] pour d'autres grandeurs physiques décrivant l'état interne du matériau. Elles concernent les contraintes locales, la vitesse de rotation des réseaux cristallins et l'écroutissage sur les systèmes de glissement. Ces relations permettent de suivre l'état interne du polycristal grain par grain et globalement pour un trajet de déformations monotone donné.

II.4. Applications

Ce calcul permet, à partir d'un polycristal modèle constitué de grains monocristallins de comportement, de morphologie et d'orientation connus, de calculer la réponse élastoplastique de chaque grain au chargement macroscopique, les modifications microstructurales et par homogénéisation, le comportement global du matériau.

Les calculs s'effectuent en définissant au préalable

- le comportement élastique du monocristal,
- l'orientation cristallographique des grains,
- leur morphologie

pour le calcul des tenseurs de localisation et

- le nombre de systèmes de glissement suivant la structure cristalline,
- les cissions critiques initiales (identique sur tous les systèmes),
- la matrice d'écroutissage du monocristal

pour le calcul de l'évolution de la microstructure. Ils permettent de caractériser les différentes caractéristiques et grandeurs développées dans ce paragraphe.

II.4.1. comportement global, estimation des textures

Le calcul, par homogénéisation, du comportement global permet de suivre l'écroutissage du polycristal lors de prédéformations, en traçant les courbes de limite d'écoulement [13,15]. Ces courbes permettent de mettre en évidence l'écroutissage isotrope et cinématique induit par la prédéformation et aux contraintes résiduelles qu'elle engendre, figure II-5. Ces contraintes peuvent être bénéfiques ou néfastes suivant le chargement ultérieur, et méritent donc d'être analysées et optimisées, au lieu d'être systématiquement éliminées.

Un avantage fondamental du calcul autocohérent est de pouvoir calculer le comportement effectif global d'un polycristal à partir de la microstructure et de son évolution. La localisation des contraintes (déformations) macroscopiques au niveau de chaque grain permet de considérer les hétérogénéités du champ de déformations plastiques et les déformations (rotations) élastiques qu'elles engendrent. Ces rotations sont responsables de la formation de textures de déformations qui ont fait l'objet de plusieurs études. L'orientation de chaque cristallite est recalculée en fonction

du champ de rotations élastiques, ω_{ij}^{el} dans chaque grain I,

$$\omega_{ij}^t = \frac{1}{2} (u_{i,j}^t - u_{j,i}^t) \quad \text{et} \quad \omega_{ij}^e = \omega_{ij}^t - \omega_{ij}^p \quad (\text{II-46})$$

elle est caractérisée par un triplet d'angles d'Euler (notation de Bunge [14]) qui évolue de la manière suivante

$$\dot{\varphi}_1 = \frac{\sin \varphi_2}{\sin \Phi} \omega_{13}^{el} - \frac{\sin \varphi_2}{\sin \Phi} \omega_{23}^{el}$$

$$\dot{\varphi}_2 = \cos \Phi \left(\frac{\sin \varphi_1}{\sin \Phi} \omega_{13}^{el} + \frac{\sin \varphi_1}{\sin \Phi} \omega_{23}^{el} \right) + \omega_{21}^{el}$$

$$\dot{\Phi} = -\cos \varphi_2 \omega_{23}^{el} + \sin \varphi_2 \omega_{13}^{el} \quad (\text{II-47})$$

Le triplet $(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$ permet le passage du repère macroscopique $(1, 2, 3)$ au repère microscopique d'un grain (C_1, C_2, C_3) , figure II-4.

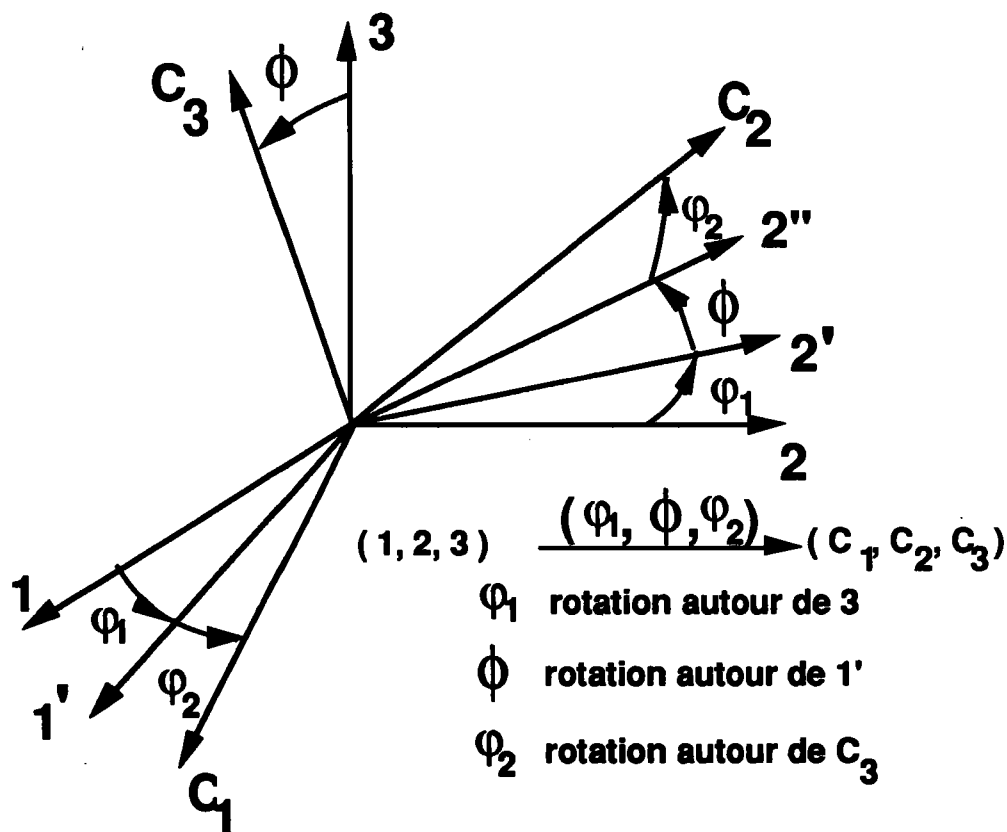
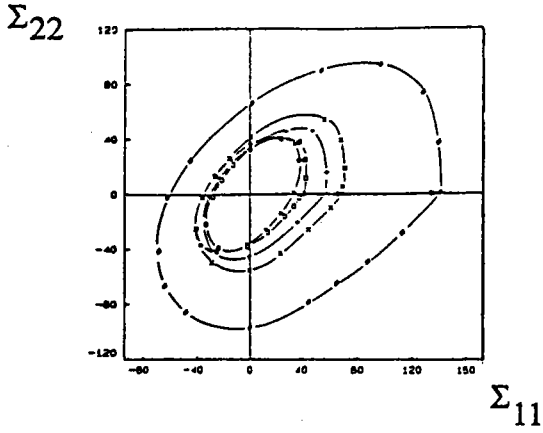
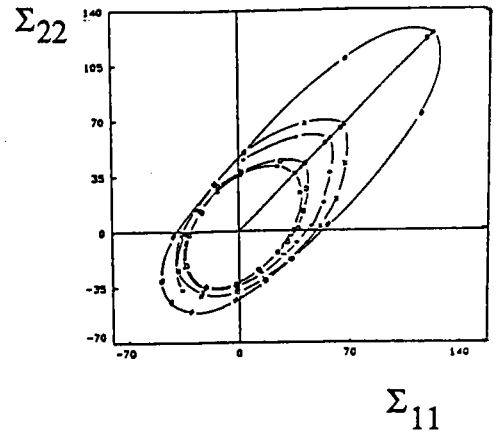


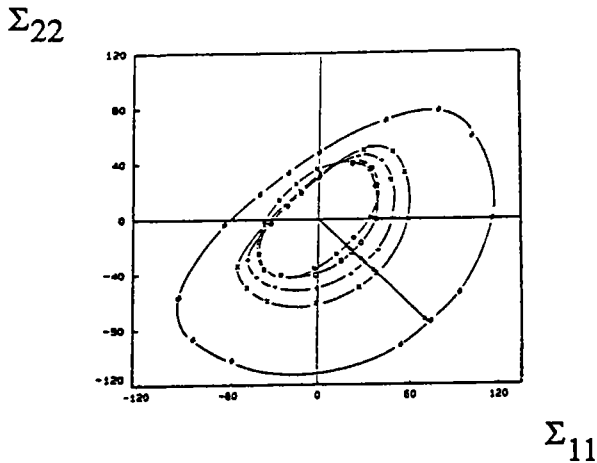
Figure II-4 : Définition des angles d'Euler.



prédéformation en traction simple 1(*)



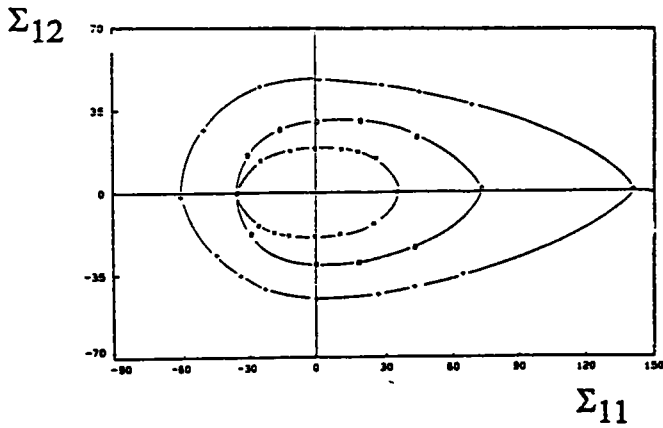
en traction équibiaxé (*)



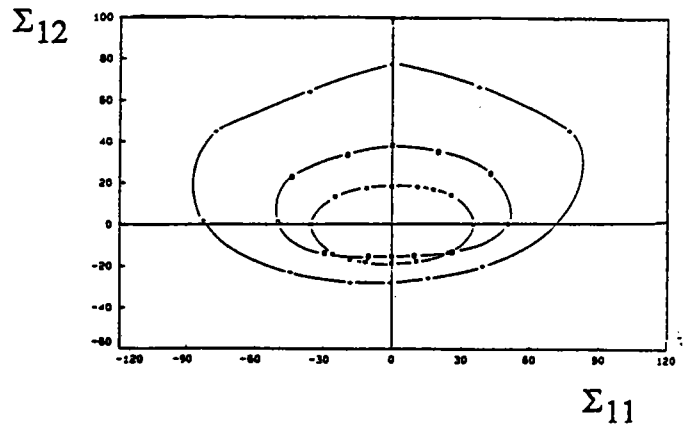
prédéformation en laminage (*)

(*) prédéformations de 0, 1, 10, 20, 60%

(**) 0, 20, 60%



prédéformation en traction simple 1 (**)

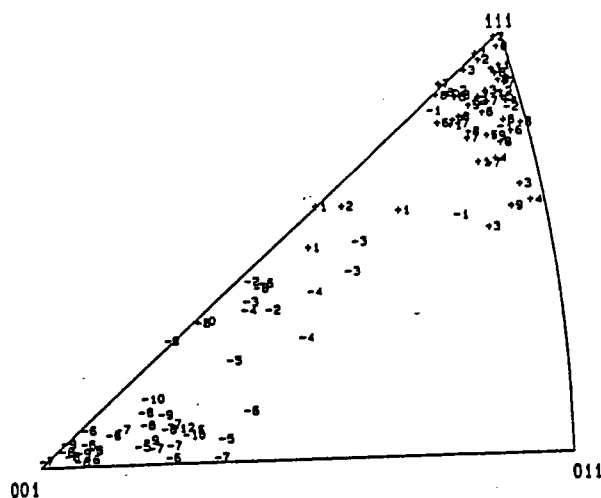


prédéformation en torsion (**)

Figure II-5 : Seuils de plasticité à 0,02% calculés pour des prédéformations en traction simple et en cisaillement de matériaux cubiques faces centrées.

Nous sommes ainsi en mesure de calculer des textures de déformations caractéristiques des matériaux cubiques faces centrées et cubiques centrés pour des chargements monotones quelconques. Les figures II-6 présente des figures de pôles inverses correspondant à des essais de traction et compression simulés par le modèle autocohérent. Les symboles représentent les directions de traction ou de compression par rapport au repère local du grain. Les chiffres correspondants aux contraintes dans la direction de traction seront commentés page 30. La figure II-6 présentent des figures de pôles pour un matériau CC après un laminage simulé par le modèle autocohérent pour une déformation plastique équivalente de 90%. Ces figures sont, pour les trois modes de déformation, conformes aux textures observées expérimentalement [13, 15]. L'intérêt des textures pour l'amélioration du comportement global est bien connu et fait l'objet de nombreuses études, surtout pour la mise en forme de tôles.

a : Traction



b : Compression

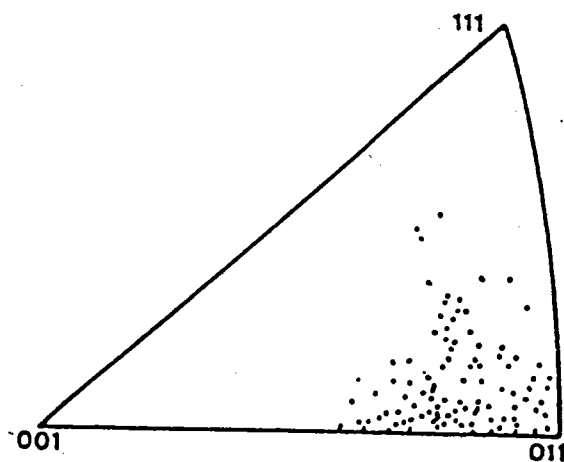
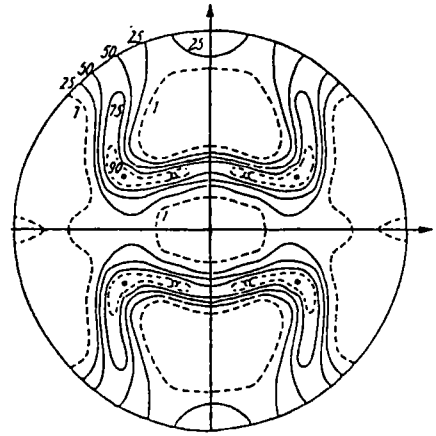
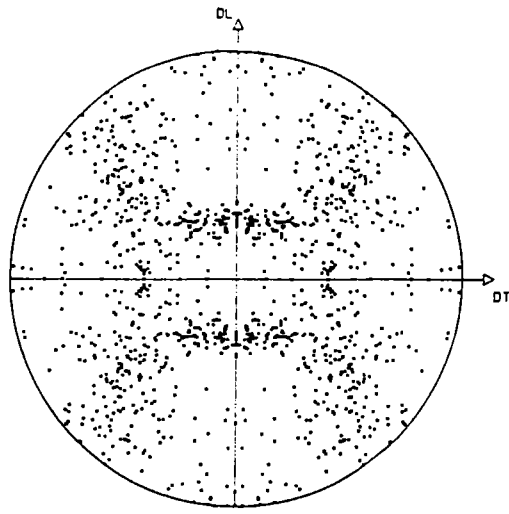
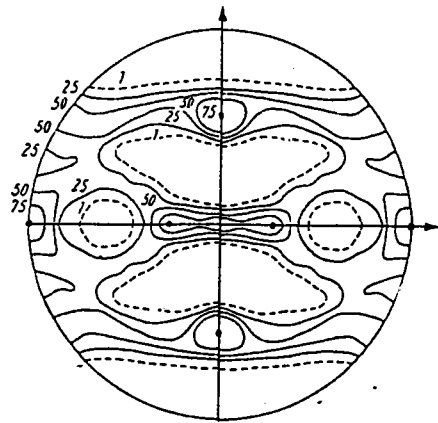
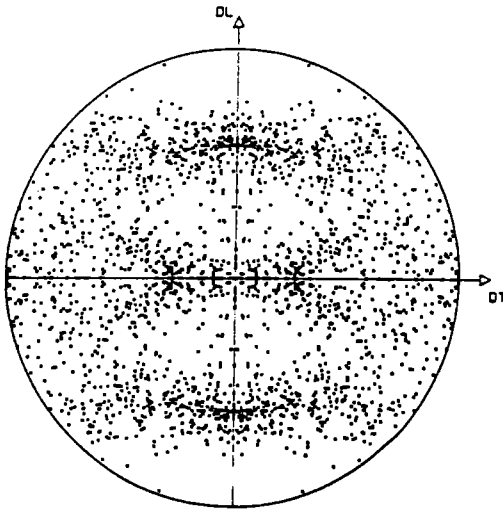


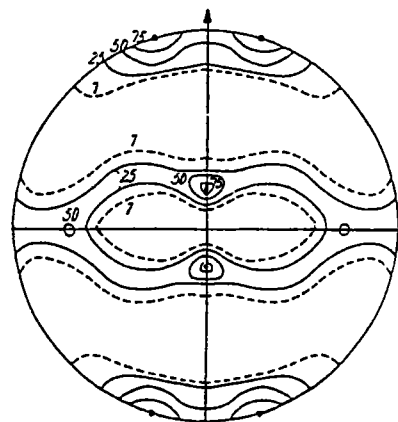
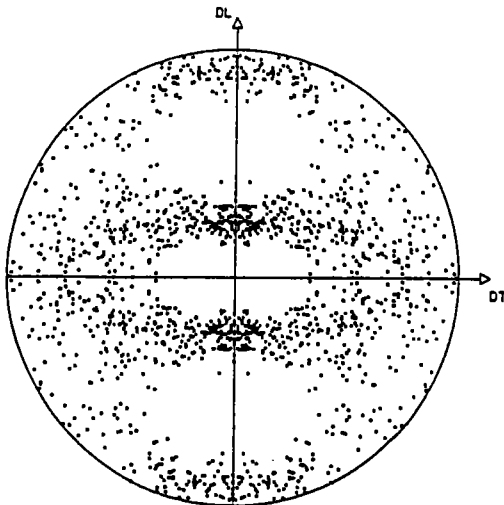
Figure II-6 : Figures de pôles inverses représentant des textures de traction (a) et de compression (b) calculées par le modèle autocohérent pour des matériaux CFC (EP = 70%).



{ 220 }



{ 111 }



Calculs

Mesures

Figure II-7 : Comparaison des textures calculées et mesurées pour une déformation équivalente de 90% en laminage d'un matériau CFC.

II.4.2. contraintes et déformations internes

Chaque cristallite est caractérisé par son comportement élastoplastique, une fraction volumique et une orientation cristallographique par rapport au repère macroscopique. Les tenseurs des contraintes et déformations, calculés pour chaque grain, permettent de suivre l'évolution des contraintes internes ou résiduelles en fonction du chargement externe ou de la déformation plastique. Il est également possible de localiser les grains fortement comprimés ou tendus en représentant les contraintes dans une direction particulière (par exemple la direction de traction [13]) sur une figure de pôles inverses. La figure II-6a représente une figure de pôles inverses d'une texture de traction ; les symboles de cette figure représentent la contrainte dans la direction suivant son orientation microscopique. Ainsi, on observe des contraintes résiduelles positives pour les grains dont l'axe (111) est parallèle à la direction de traction et négatives pour l'axe (001) conformément aux observations sur les monocristaux CFC.

D'autres représentations telles que figures de pôles de déformations, de contraintes,...., sont également possibles .

II.4.3. Energie bloquée

Dans les bilans énergétiques du processus de déformation plastique, une partie du travail de déformation plastique W_a est transformée en énergie bloquée dans le polycristal sous la forme de contraintes internes du second ordre, U_b^σ . Une autre partie (bloquée également) est associée à l'augmentation de la densité de dislocations, U_b^d (écrouissage intragranulaire). La partie complémentaire Q est dissipée.

D'après le premier principe, on a

$$W_a = Q + \left(U_b^\sigma + U_b^d \right) \quad (\text{II-48})$$

On définit la fraction d'énergie bloquée F par le rapport

$$F = \frac{U_b^\sigma + U_b^d}{W_a} \quad (\text{II-49})$$

dont la mesure peut être effectuée par différentes méthodes [16,17, 18].

Le terme U_b^d contient également une part d'énergie bloquée due aux contraintes internes du troisième ordre. De nombreux modèles [19, 20] ont été proposés pour évaluer ce terme à partir de la densité de dislocations et de leur répartition. Si on reprend le modèle de Bailey et Hirsch [19] et si on l'adapte à la situation du glissement multiple qui prédomine dans le polycristal, on constate [21] que le terme U_b^σ reste prédominant par rapport à U_b^d .

Nous négligeons donc la contribution de U_b^d et nous admettons que $F = U_b^\sigma / W_a$.

Le terme U_b^σ s'obtient pour une déformation donnée E^P par la somme sur tous les grains

$$U_b^\sigma = \frac{1}{2} \sum_{I=1}^N f^I \sigma_{ij}^I \varepsilon_{ij}^{Ie} \quad (\text{II-50})$$

Le travail fourni W_a s'obtient à partir de

$$W_a = \int_0^{E^P} \Sigma_{ij} dE_{ij}^P \quad (\text{II-51})$$

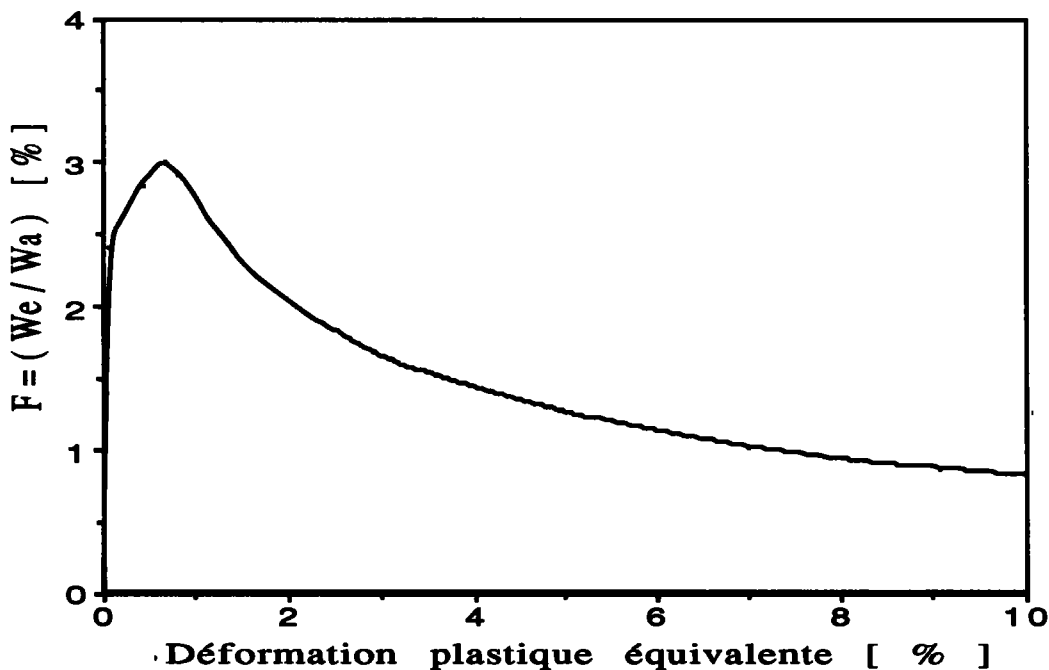


Figure II-8 : Evolution de la fraction d'énergie bloquée globale lors d'un essai de traction simple d'un matériau CFC.

L'énergie bloquée constitue par comparaison avec les mesures expérimentales une validation des bases théoriques du modèle [21]. La figure II-8 montre l'évolution de la fraction d'énergie bloquée dans un polycristal CFC soumis à un essai de traction. La figure II-9 montre l'évolution de l'énergie bloquée sous forme de contraintes de deuxième ordre pendant un essai séquentiel (traction + compression) pour laquelle on observe une phase de restitution d'énergie lors du changement de trajet de déformation.

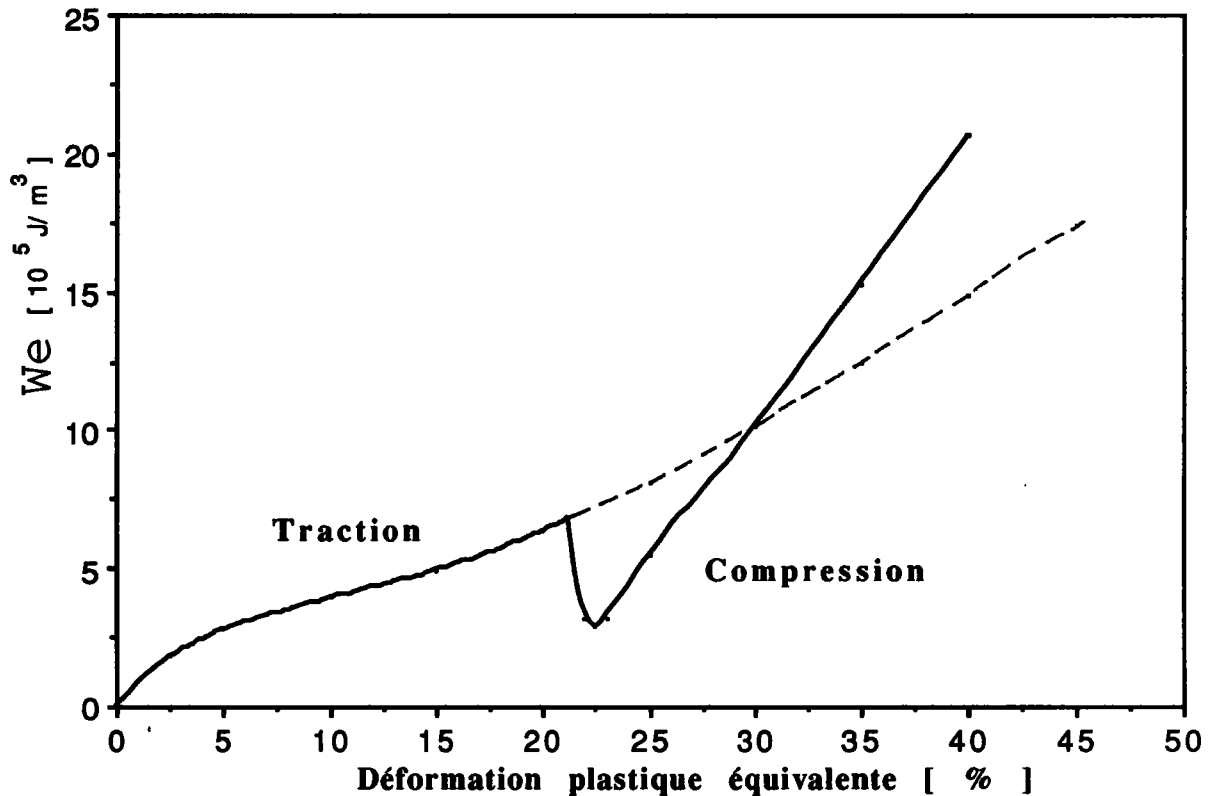


Figure II-9 : Evolution de l'énergie élastique bloquée globale sous forme de contraintes du deuxième ordre pour un chargement séquentiel traction+compression.

II.4.4. courbes $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2 \Psi)$

La technique de détermination des contraintes internes basée sur la loi des $\sin^2 \Psi$ donne lieu à la mesure de déformations de réseau dans les directions de mesure (φ, ψ), figure II-2, dont la représentation en fonction de $\sin^2 \Psi$ permet de définir les contraintes internes (cf. II.1.).

Les valeurs de déformations (contraintes) calculées par le modèle autocohérent permettent de

simuler l'évolution des courbes $\varepsilon = f(\sin^2 \psi)$ à φ donné. L'orientation cristallographique de chaque constituant, nous permet de déterminer les angles (φ, ψ) correspondant à la normale à tous les plans d'une famille $\{hkl\}$. Tous les grains possédant une normale $N_{\varphi\psi}$ dont les angles sont compris dans les intervalles $[\varphi + \Delta\varphi, \varphi - \Delta\varphi]$ et $[\psi + \Delta\psi, \psi - \Delta\psi]$ sont considérés en position de diffraction donc faisant partie du volume diffractant. La représentation des courbes $\varepsilon = f(\sin^2 \psi)$ à partir des calculs en élasticité et élastoplasticité permettra de comparer directement les déformations mesurées et calculées.

II.5. Conclusions

Le modèle autocohérent permet de localiser le chargement imposé à un milieu macrohomogène et microhétérogène au niveau de chaque grain, de déterminer les grandeurs locales de contraintes et de déformations et l'évolution de la loi de comportement locale et de la microstructure en intégrant l'influence des hétérogénéités élastiques et plastiques. Les opérations d'homogénéisation, qui se présentent comme de simples opérations de moyenne pour les contraintes et les déformations locales, conduisent aux valeurs macroscopiques respectives.

Les travaux antérieurs ont permis de vérifier que ce modèle est en mesure d'estimer les textures de déformations pour les matériaux polycristallins de type CC et CFC [13, 15]. Ils montrent également des prédictions correctes du comportement effectif en simulant les seuils de plasticité après des prédéformations en traction et en cisaillement [13, 15]. Le calcul de l'énergie élastique bloquée a permis de valider l'ordre de grandeur des contraintes résiduelles calculées [21].

La mesure des déformations élastiques par diffraction des rayons X est une démarche bien établie et elle correspond à une valeur moyenne sur le volume diffractant dans la direction de mesure. Si le polycristal mono- ou multiphasé se compose de grains d'orientation aléatoire, la loi des $\sin^2\psi$ permet de déterminer sans ambiguïté l'état de contraintes macroscopique à partir du comportement linéaire. L'apparition d'écarts à la linéarité liés à la présence d'une texture cristallographique et/ou de

contraintes résiduelles rend cette détermination délicate, voire fautive. Le calcul des grandeurs locales de contraintes et de déformations par le modèle autocohérent permet de simuler la déformation moyenne mesurée dans le volume diffractant. Nous pouvons ainsi simuler l'influence des hétérogénéités élastoplastiques sur l'évolution de la loi des $\sin^2\Psi$ et visualiser l'influence de la sélectivité des mesures par diffraction des rayons X. La comparaison des déformations mesurées et calculées devrait également valider les contraintes internes et résiduelles obtenues par le modèle autocohérent.

Ces calculs permettront également de porter un jugement sur la validité de la loi des $\sin^2\Psi$ en présence de contraintes résiduelles.

Chapitre III

III. Elasticité

III.1. Calcul autocohérent élastique

III.2. Polycristaux isotropes et macro-isotropes

III.3. Influence d'une texture cristallographique

III.4. Influence d'une texture cristallographique

III.5. Influence d'une texture morphologique

III.6. Conclusions

III. Elasticité

Ce chapitre est consacré à l'influence des hétérogénéités des caractéristiques élastiques sur le développement des contraintes internes dans les polycristaux. Le modèle autocohérent permet de localiser le chargement extérieur au niveau de chaque grain d'un polycristal, connaissant son comportement élastique, son orientation cristallographique et sa morphologie.

Nous construisons des polycristaux modèles qui permettent de dissocier et d'étudier les différentes sources d'hétérogénéités.

Le polycristal modèle est dans un premier temps constitué de grains sphériques d'orientation aléatoire, ce qui lui confère un comportement macroscopique isotrope.

Dans le deuxième cas, il présente une forte texture de laminage qui rompt l'isotropie macroscopique. Dans les deux cas, nous étudions l'influence des contraintes (déformations) d'ordre II sur la loi des $\sin^2\Psi$ et sur le comportement effectif du polycristal. Nous nous attachons également à mettre en évidence l'origine des contraintes d'ordre II.

Pour finir, nous étudions un polycristal composé de grains d'orientation cristallographique aléatoire mais possédant deux morphologies particulières pour montrer que la morphologie des constituants peut également être à l'origine de contraintes d'ordre II et d'écarts dans la loi des $\sin^2\Psi$. Les hétérogénéités dues à la morphologie des constituants n'ont à notre connaissance fait l'objet d'aucune étude spécifique.

III.1. Calcul autocohérent élastique

Le modèle autocohérent permet de déterminer la réponse élastique d'un polycristal à un champ de déformations élastiques macroscopiques E ou à un champ de contraintes macroscopiques Σ , pour des matériaux microhétérogènes et macrohomogènes. Le traitement en élasticité, issu de l'équation (II-18), conduit à l'équation intégrale suivante

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) = E_{ij} + \int_V \Gamma_{ijkl}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta c_{klmn}(\mathbf{r}') \varepsilon_{mn}(\mathbf{r}') dV \quad (\text{III-1})$$

et permet de déterminer, pour l'approximation autocohérente à un site, les déformations locales

dans le grain I à partir de l'équation (II-41)

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^I = E_{ij} + T_{ijkl}^{\text{II}} \Delta c_{klmn}^I \boldsymbol{\varepsilon}_{mn}^I \quad (\text{III-2})$$

Cette équation permet de déterminer les tenseurs de localisation de la déformation macroscopique, $\boldsymbol{\varepsilon}^I = \mathbf{A}^I \mathbf{E}$, sous la forme

$$\mathbf{A}^I = \left(\mathbf{I} - \mathbf{T}^{\text{II}} \Delta \mathbf{c}^I \right)^{-1} \quad (\text{III-3})$$

qui permet de calculer le comportement effectif du polycristal, composé de N grains de fraction volumique identique f, où c représente le tenseur des constantes élastiques

$$\mathbf{C}_{ijmn}^{\text{eff}} = \sum_N f^I c_{ijkl}^I \mathbf{A}_{klmn}^I \quad (\text{III-4})$$

De la même façon, nous pouvons déterminer un tenseur \mathbf{B}^I de localisation des contraintes macroscopiques, $\boldsymbol{\sigma}^I = \mathbf{B}^I \boldsymbol{\Sigma}$

où
$$\mathbf{B}^I = \mathbf{c}^I \mathbf{A}^I \left(\mathbf{C}^{\text{eff}} \right)^{-1} \quad (\text{III-5})$$

Les premiers modèles de la littérature permettant de relier les grandeurs globales aux grandeurs locales consistent à négliger le problème de localisation.

Le modèle de Voigt [1] néglige toutes les sources d'hétérogénéités en supposant que $\boldsymbol{\varepsilon}^I = \mathbf{E}$ avec $\mathbf{A}^I = \mathbf{I}$.

Le modèle de Reuss [2] qui suppose que $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\Sigma}$ et revient donc à considérer que $\mathbf{B}^I = \mathbf{I}$ exagère l'influence des hétérogénéités.

Ces deux modèles ne constituent que des bornes du comportement effectif du polycristal.

Le modèle de Kröner [5], basé sur la solution du problème de l'inclusion dans une matrice, constitue une solution exacte dans le cas d'un polycristal parfaitement désordonné. Il permet de valider nos calculs.

III.2. Polycristaux isotropes et macro-isotropes

matériau élastiquement isotrope

Nous considérons un polycristal composé de 1000 grains sphériques. Dans un premier temps, les cristallites sont parfaitement désordonnés et ont un comportement élastique isotrope caractérisé par le module d'Young $E = 227 \text{ GPa}$ et un coefficient de Poisson $\nu = 0,24$. Nous effectuons un essai de traction simple en imposant un champ de contraintes macroscopiques $\Sigma : \Sigma_{11} = 100 \text{ MPa}$. Le modèle autocohérent élastique permet de calculer la réponse élastique de chaque cristallite et de simuler les courbes $\varepsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2 \Psi)$. Pour ce type de polycristaux, les contraintes, σ_{ij}^I et les déformations locales, ε_{ij}^I sont homogènes dans l'ensemble du matériau et égales respectivement à Σ et E ; nous nous trouvons dans le cas parfait de l'application de la loi des $\sin^2 \Psi$. Les courbes simulées montrent dans ce cas un comportement parfaitement linéaire indépendant de la famille de plans $\{hkl\}$ utilisée en diffraction. Dans ce cas les constantes élastiques radiocristallographiques sont égales aux constantes mécaniques

$$\frac{1}{2} S_2 = \frac{1 + \nu}{E}, \quad S_1 = \frac{-\nu}{E} \quad (\text{III-6})$$

matériau élastiquement anisotrope

Les matériaux industriels et, à plus forte raison, les nouveaux matériaux ne possèdent que très rarement ces caractéristiques parfaites. Pour nous rapprocher de la réalité, nous effectuons maintenant des calculs sur des polycristaux de cuivre et de fer pur au comportement monocristallin anisotrope. Les constantes élastiques du cuivre et du fer sont données par le tableau III-1. Les grains sont sphériques, parfaitement désordonnés et confèrent au polycristal un comportement macroscopique isotrope. L'anisotropie du monocristal induit une dépendance entre les constantes élastiques radiocristallographiques et la famille de plans d'investigation. En effet, les normales au plan diffractant de deux grains en position de diffraction ont la même direction, mais les déformations sont différentes selon leur orientation cristallographique autour de la direction de mesure à cause de l'anisotropie monocristalline. Cette rotation propre autour de la normale au

plan de mesure est caractérisé par l'angle β . De nombreux autres auteurs [22, 23] ont montré, en utilisant l'hypothèse de Reuss, que les familles de plans $\{h00\}$ et $\{hhh\}$ sont, pour des raisons de symétrie du système cubique, insensibles à la rotation propre autour de la direction de mesure, et ne sont donc pas affectées par l'anisotropie des cristallites.

	C11 (GPa)	C12 (GPa)	C44 (GPa)	A
Cuivre	173	123	75	3
Fer	242	144	118	2,4

Tableau III-1 : Constantes élastiques et anisotropie A des monocristaux.

La figure III-1 montre l'évolution des courbes de déformations $\varepsilon_{\varphi\psi}$ calculées pour un polycristal de fer pur macroscopiquement isotrope. Sur les courbes $\{hkl\}_p$ indicées p de cette figure chaque point représente la déformation pour un grain du volume diffractant.

On observe pour les plans $\{200\}_p$ et $\{222\}_p$ une droite quasi parfaite ce qui confirme les analyses expérimentales.

Pour les plans $\{211\}_p$ par contre, on observe un nuage de points qui met en évidence la fluctuation des déformations internes et des contraintes d'ordre II pour des grains possédant la même direction de mesure (angles φ et ψ fixés). Ce phénomène est présent pour tous les plans différents de $\{h00\}$ et $\{hhh\}$. La moyenne de ces fluctuations permet de retrouver un comportement parfaitement linéaire de la loi des $\sin^2\psi$ sur les courbes $\{hkl\}_m$. Ces figures confirment la linéarité du comportement de tous les plans de diffraction pour un matériau macroscopiquement isotrope. Les pentes et les ordonnées à l'origine de ces droites dépendent de l'anisotropie monocristalline et permettent de recalculer les constantes élastiques radiocristallographiques relatives à chaque famille de plans $\{hkl\}$.

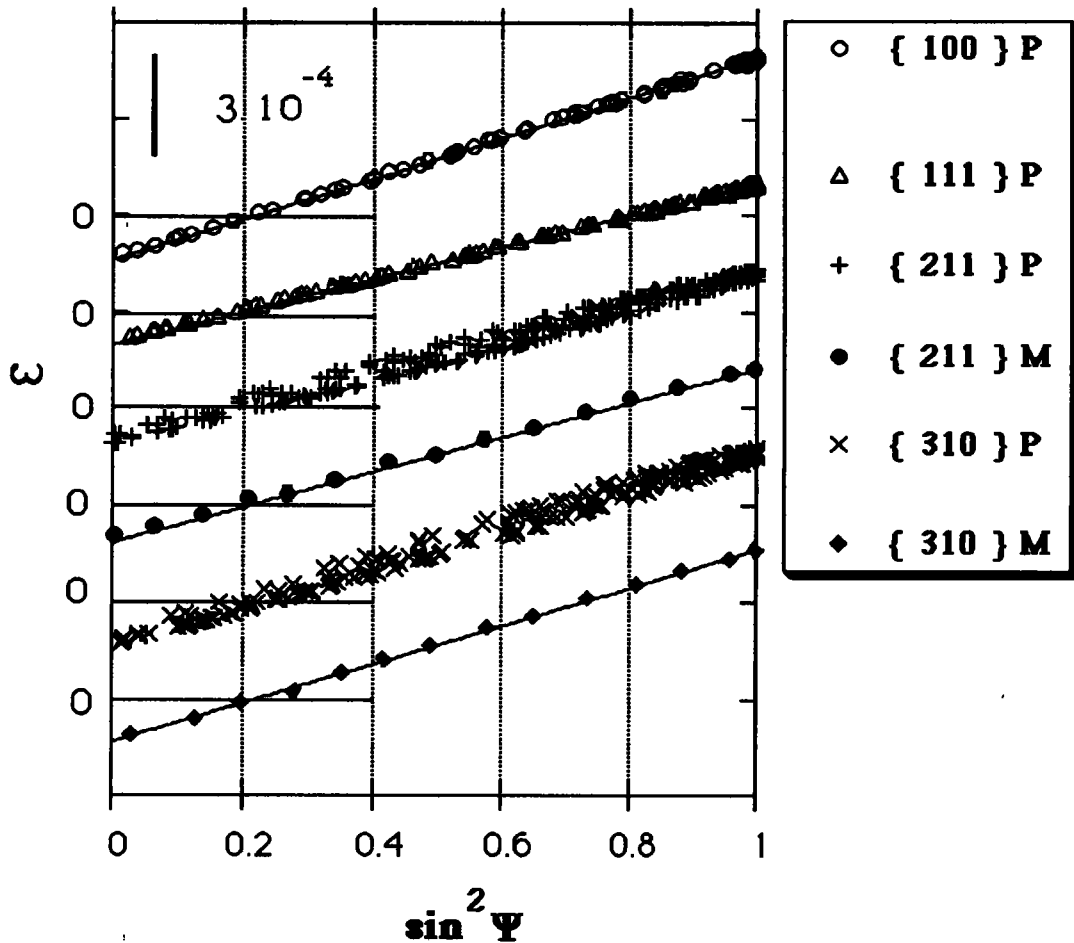


Figure III-1 : Evolution des courbes $\varepsilon_{\phi\psi} = f(\sin^2 \Psi)$ pour un polycristal de fer pur macroscopiquement isotrope ($\Sigma_{11} = 100$ MPa).

La figure III-1 permet également de montrer que les contraintes d'ordre II induisent un élargissement des pics de diffraction. Pour les courbes $\{200\}_p$ et $\{222\}_p$ deux grains de même normale subissent les mêmes microcontraintes et vont contribuer à augmenter l'intensité du pic de diffraction sans modifier sa position. Sur la courbe $\{211\}_p$, deux grains possédant le même normale de mesure subissent des microcontraintes différentes et vont diffracter pour des angles 2θ différents. Ces contraintes d'ordre II provoquent un élargissement du pic global pour le volume diffractant, figure III-2.

La figure III-3 présente les courbes calculées moyennes et des résultats similaires pour le cuivre.

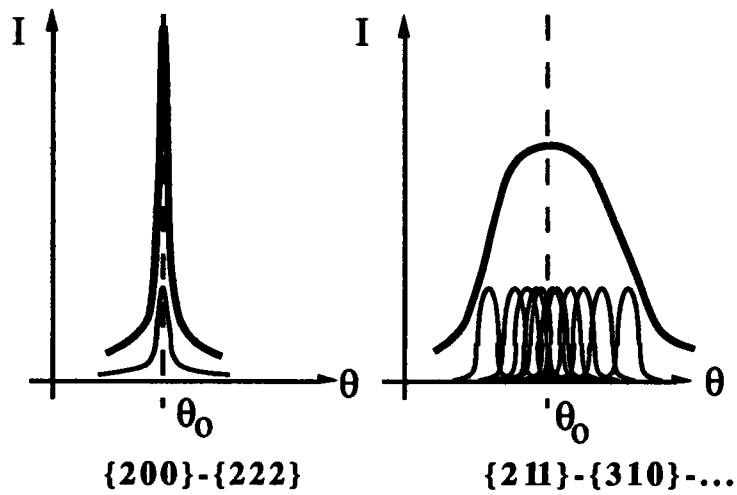


Figure III-2 : Influence des contraintes d'ordre II sur la largeur du pic de diffraction.

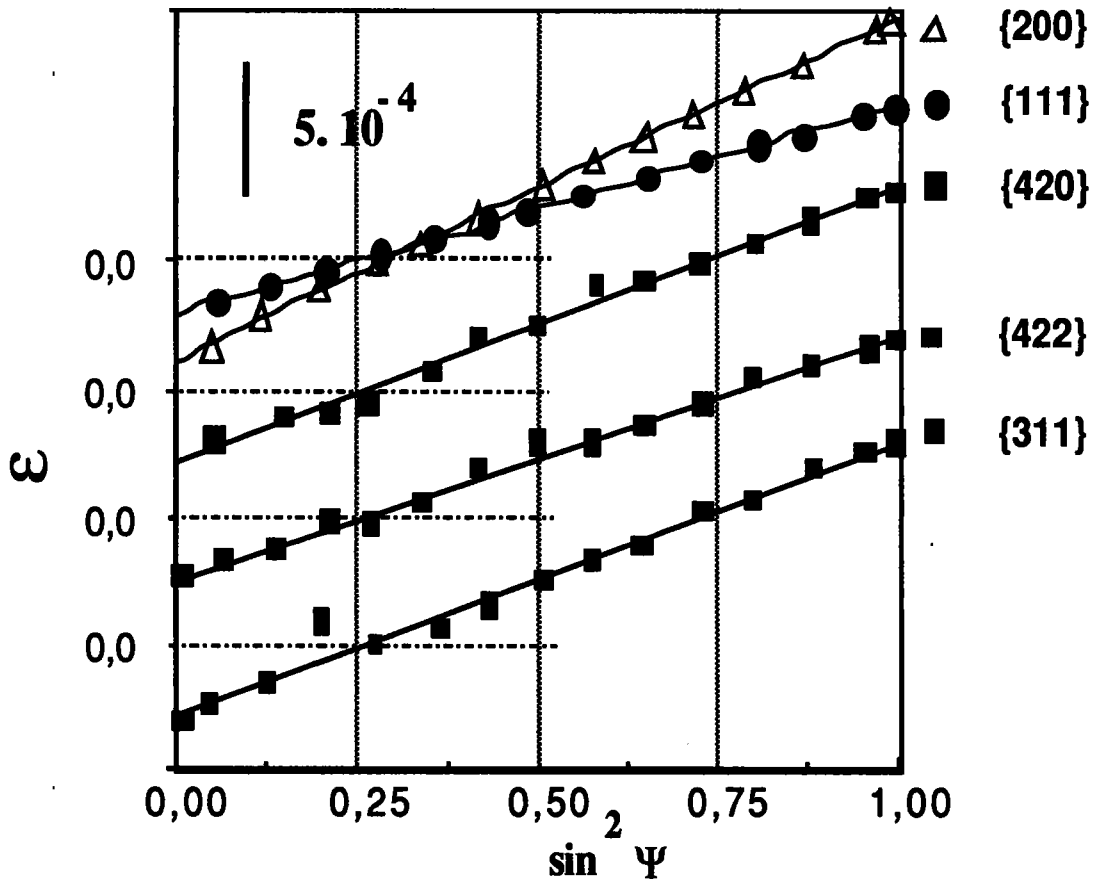


Figure III-3 : Evolution des courbes moyennes $\epsilon_{\phi\Psi} = f(\sin^2\Psi)$ pour un polycristal de cuivre macroscopiquement isotrope ($\Sigma_{11} = 100$ MPa).

cuivre						
$1/2 S^2$	hkl	Voigt	Reuss	Kröner	Exp.	SC
		400	9,3	20,5	13,4	13,3
	222	9,3	6,7	8,4	8,3	8,2
Fer						
10^{-6} MPa ⁻¹	800	5,62	10,5	7,6	7,0	6,67
	222	5,62	4,3	5,1	5,3	5,09

Tableau III-2 : Constantes élastiques radiocristallographiques pour un matériau recristallisé calculées par différents modèles et mesurées (SC : Calcul self-consistent)

	cuivre				Fer			
	$1/2 S_2$	S_1		$1/2 S_2$	S_1			
hkl	400	331	400	331	211	310	211	310
Exp	13,3	9,76	-4,3	-2,1	5,85	6,58	-1,25	-1,64
SC	13,2	9,1	-3,46	-2,31	5,56	6,81	-1,33	-1,8

Tableau III-3 : Constantes élastiques radiocristallographiques pour des matériaux polycristallins recristallisés: comparaison entre mesures expérimentales et valeurs calculées par le modèle autocohérent (SC). (en 10^{-6} MPa⁻¹).

Les microcontraintes dans un matériau macroscopiquement isotrope augmentent la largeur du pic de diffraction, mais ne modifient pas sa position moyenne en 2θ . Les courbes $\varepsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2 \Psi)$ restent linéaires et permettent de déterminer les contraintes macroscopiques et le comportement effectif du polycristal. Les valeurs des constantes élastiques, $1/2S_2(hkl)$ et $S_1(hkl)$ recalculées, à partir des figures III-1 pour le fer et III-2 pour le cuivre, sont comparées dans les tableaux III-2 et III-3 aux valeurs obtenues par les différents modèles et par des mesures expérimentales sur des matériaux recristallisés [24]. Les valeurs calculées sont très proches des valeurs mesurées et des valeurs données par Kröner, les écarts sont à attribuer aux légères différences de constantes élastiques monocristallines utilisées par les deux méthodes.

III.3. Influence d'une texture cristallographique

La présence d'une texture cristallographique et d'une anisotropie élastique induit :

- une anisotropie macroscopique des constantes élastiques,
- des oscillations dans la loi des $\sin^2\Psi$.

La prise en compte de la texture pour la détermination des contraintes internes et du comportement effectif peut s'effectuer par l'intermédiaire des orientations idéales représentatives de la texture. Cette procédure remplace une distribution continue d'orientations par quelques orientations (<10) auxquelles sont affectées les constantes élastiques anisotropes du monocristal et la fraction volumique de ces orientations. Les monocristaux sont noyés dans une matrice isotrope. Pour effectuer les transitions d'échelles, Nagashima [25], Dölle [26] et Hauk [27] utilisent le modèle de Reuss. Hauk et Dölle [28] montrent que le nombre de directions indépendantes de texture est lié au facteur de multiplicité des plans diffractants $\{hkl\}$ et que les plans à forte multiplicité sont peu sensibles à la texture. Ils montrent également que la loi des $\sin^2\Psi$ reste linéaire pour les plans de type $\{h00\}$ et $\{hhh\}$. Les inconvénients de cette méthode résident dans le fait que les constantes élastiques ne peuvent être déterminées que pour des directions particulières pour de fortes textures présentant des orientations idéales bien définies.

Une autre voie consiste à utiliser la Fonction de Distribution des Orientations (FDO (Ω)) qui représente la proportion de grains d'orientation $\Omega(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$, notation de Bunge [14]. Brackman [28] utilise directement les coefficients du développement en harmoniques sphériques pour calculer les constantes élastiques radiocristallographiques. Barral [29] et Serruys [30] pondèrent les constantes élastiques monocristallines par la FDO. Cette méthode représente de façon satisfaisante les textures quelle que soit leur importance et quelle que soit la méthode de calcul de la FDO (harmoniques sphériques, méthode vectorielle, ...). Le couplage microdéformations-macrocontraintes est effectué à l'aide du modèle de Reuss et permet de reproduire de manière grossière l'influence de la texture sur les contraintes d'ordre II. Serruys [30] combine les modèles de Voigt et de Reuss, sans raison physique, uniquement pour approcher les courbes mesurées $\epsilon_{\varphi\Psi}$ en fonction de $\sin^2\Psi$.

Toutes ces méthodes permettent d'approcher les mesures effectuées par diffraction des rayons X et de déterminer le champ de contraintes macroscopiques à partir des valeurs moyennes mesurées sur

le volume diffractant dans la direction de mesure.

Une méthode de calcul par éléments finis proposée par Noyan et Nguyen [31] permet de calculer les déformations locales pour des orientations représentant une texture et d'obtenir une image de l'influence des hétérogénéités élastiques et des contraintes du deuxième ordre liés à une orientation cristallographique. Cette méthode présente l'avantage de ne pas utiliser de modèle pour les transitions d'échelles, mais ne permet que de considérer un faible nombre d'éléments biaxiaux qui limitent l'utilisation aux chargements en contraintes et déformations planes. Elle permet néanmoins de retrouver les oscillations caractéristiques liées à la texture.

modèle autocohérent

Le modèle autocohérent permet de prendre en compte directement la texture et son influence sur les grandeurs locales. Pour vérifier les résultats présentés précédemment, nous considérons un polycristal composé de 1000 grains sphériques présentant une forte texture de laminage. Ce polycristal est obtenu en effectuant, à partir d'orientations aléatoires, un essai de laminage jusqu'à une déformation équivalente de 100%. Nous éliminons les contraintes résiduelles avant de simuler un essai de traction dans la direction de laminage, $\Sigma = 100$ MPa. Les contraintes internes obtenues par ce calcul permettent de simuler les courbes $\varepsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2 \Psi)$ pour des polycristaux de cuivre et de fer pur. Les comportements élastiques anisotropes des deux matériaux sont donnés dans le tableau III-1.

Les courbes $\varepsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2 \Psi)$ présentent toujours un comportement linéaire pour les plans $\{h00\}$ et $\{hhh\}$, avec cependant des plages en $\sin^2 \Psi$ pour lesquels les grains en position de diffraction sont rares, voire inexistants.

Pour des plans différents, on observe une réorganisation du nuage de points de la figure III-1, l'absence de certaines orientations, ou la présence d'orientations préférentielles modifie l'équilibre autour de la droite isotrope moyenne et donne naissance aux oscillations caractéristiques pour ces polycristaux. Les résultats pour le fer sont présentés sur la figure III-4 où tous les grains du volume diffractant sont représentés.

On observe, pour les plans différents de $\{h00\}$ et $\{hhh\}$, une diminution de la largeur du nuage de points pour certains angles Ψ consécutive à l'absence de certaines orientations autour de la direction de mesure. Il en découle une diminution de la largeur et un déplacement du pic de diffraction pour ces angles, figure III-5.

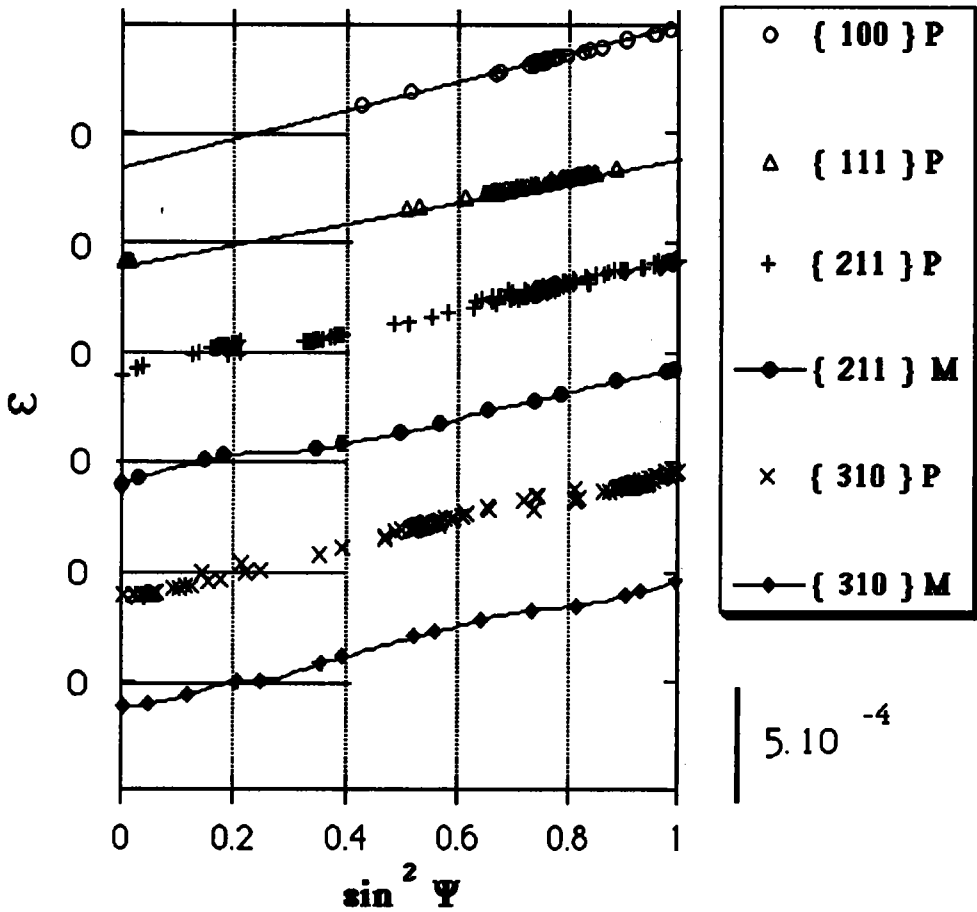


Figure III-4 : Evolution des courbes $\epsilon_{\phi\psi} = f(\sin^2 \Psi)$ pour un polycristal de fer possédant une forte texture de laminage ($\Sigma_{11} = 100 \text{ MPa} // \text{DL}$).

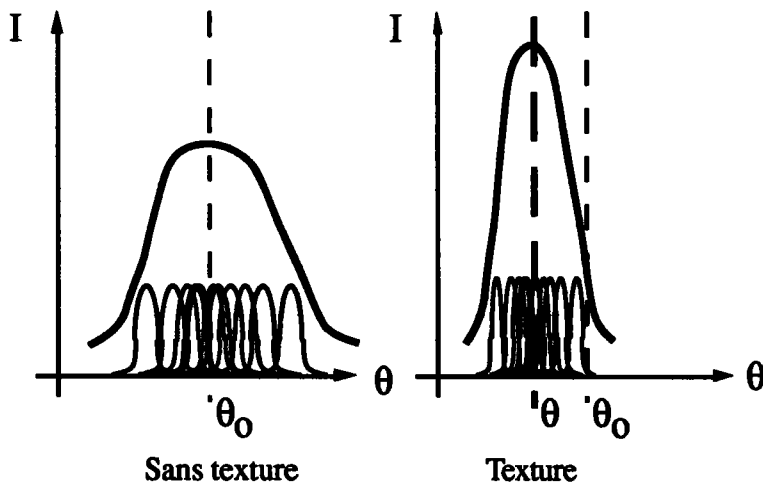


Figure III-5 : Influence d'une texture cristallographique sur la largeur du pic de diffraction à Ψ donné.

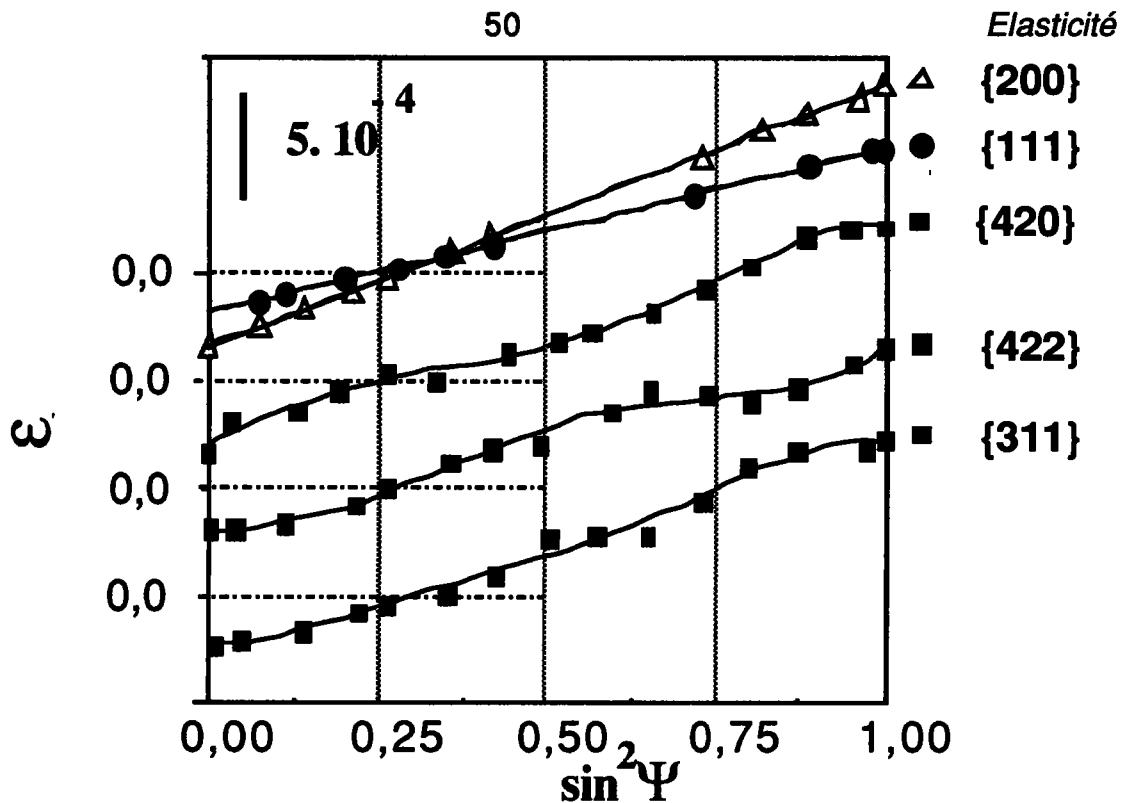


Figure III-6: Evolution des courbe $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2 \Psi)$ pour un polycristal de cuivre possédant une forte texture de laminage ($\Sigma_{11} = 100$ MPa).

La figure III-6 présente les courbes de déformation moyennes pour le cuivre. Les résultats sont analogues pour les plans {h00} et {hhh}, mais les oscillations sont différentes pour ce type de réseau cristallin.

La figure III-7 permet de comparer une mesure de déformations $\varepsilon_{\varphi\psi}$ effectuées sur un acier doux laminés à 80% [37] et les courbes de déformations calculées. Le polycristal est composé dans l'état de référence de 800 grains sphériques d'orientation cristallographique aléatoire. Le comportement élastique des monocristaux est donné par le tableau III-1. Nous imposons ensuite au polycristal des contraintes de laminage, $\Sigma_{11} = -\Sigma_{33} = \Sigma$, jusqu'à une déformation de 80% pour obtenir la texture de laminage. Nous ne considérons que la texture cristallographique, les contraintes résiduelles sont supposées nulles. Le polycristal est complété de 200 grains sphériques d'orientation aléatoire et soumis à une contrainte de traction dans la direction de laminage de 600 MPa. Les contraintes internes, calculées de cette manière, permettent de simuler les courbes $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2 \Psi)$ dans la direction de traction pour la famille de plans {211}. L'accord entre expérience et calcul est remarquable, tant au niveau qualitatif que quantitatif.

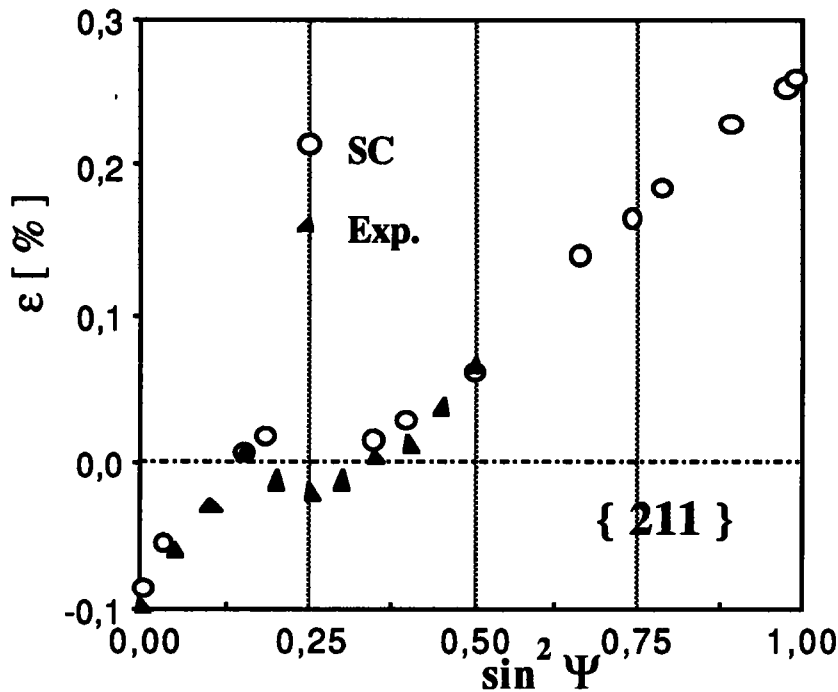


Figure III-7 : Comparaison entre courbes $\varepsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2 \Psi)$ mesurées et calculées par le modèle autocohérent élastique (SC), $\Sigma_{11}=600\text{MPa} // \text{DL}$.

III.4. Influence de la rotation propre : angle β

Nous avons montré précédemment que les déformations normales aux plans de types différents de $\{h00\}$ et $\{hhh\}$ présentaient des fluctuations suivant l'orientation des cristallites autour de la normale de mesure. En fait, c'est ce phénomène qui est responsable des oscillations observées et calculées en présence de texture. En effet en présence de texture toutes les rotations autour de la normale ne sont plus représentées, ce qui crée un déséquilibre par rapport à la valeur moyenne et une déviation par rapport au comportement quasi-isotrope.

Pour mettre en évidence ce problème, nous avons recomposé le triplet d'angles d'Euler des orientations pour que, par diffraction, la normale au plan de mesure occupe une position définie sur les courbes $\varepsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2 \Psi)$ pour toutes les orientations β possibles autour de cette normale. Pratiquement, on fixe φ et Ψ , matérialisant la normale au plan (211) avant de

calculer le triplet d'Euler correspondant à un angle β dans l'intervalle $[0, 360^\circ]$. Ces grains particuliers sont noyés dans un polycristal macroscopiquement isotrope composé de 1000 grains. Le comportement élastique des monocristaux est anisotrope et tous les grains du polycristal sont sphériques.

L'évolution des courbes $\varepsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2 \Psi)$ présentée figure III-8 pour un plan (211) montre que les déformations sont fortement dépendantes de l'orientation propre des grains autour de la direction de mesure. On retrouve ici l'origine du nuage de points de la figure III-1 ; l'absence de certaines orientations β autour de la normale au plan (texture) provoque l'apparition d'oscillations. Les courbes dans le cas du matériau macroscopiquement isotrope diffèrent très peu de ces courbes ; le comportement anisotrope des cristallites est ici prépondérant. La figure III-9 présente l'évolution des déformations en fonction des angles β à φ donné pour différentes valeurs de Ψ . On peut remarquer immédiatement le caractère sinusoïdal de ces courbes très différent suivant l'angle Ψ . Les oscillations sont très différentes suivant l'angle Ψ et très faibles pour un angle Ψ proche de 90° .

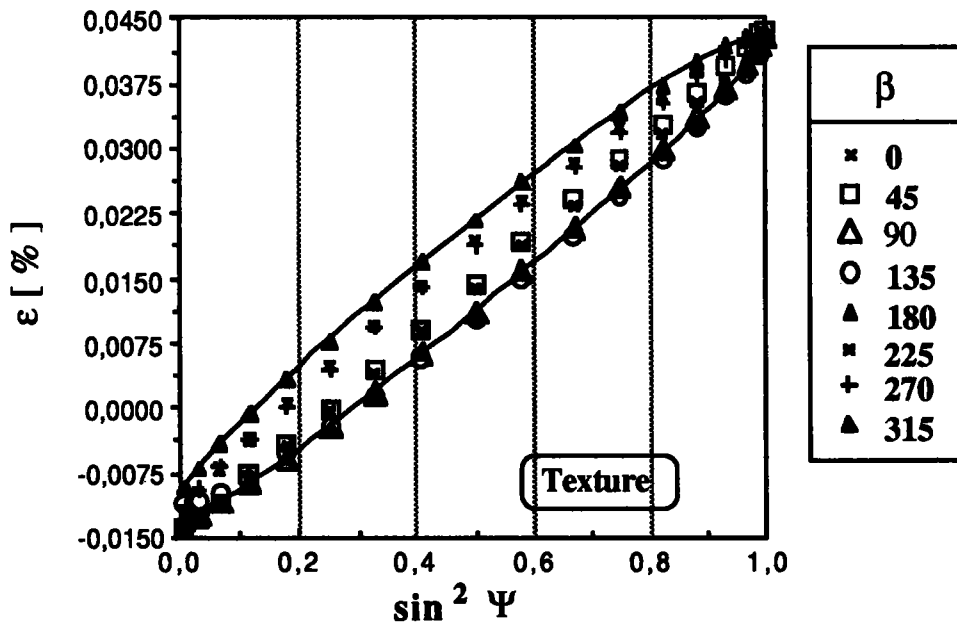


Figure III-8 : Evolution des courbes $\varepsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2 \Psi)$ suivant l'orientation β autour de la normale au plan (211) de mesure.

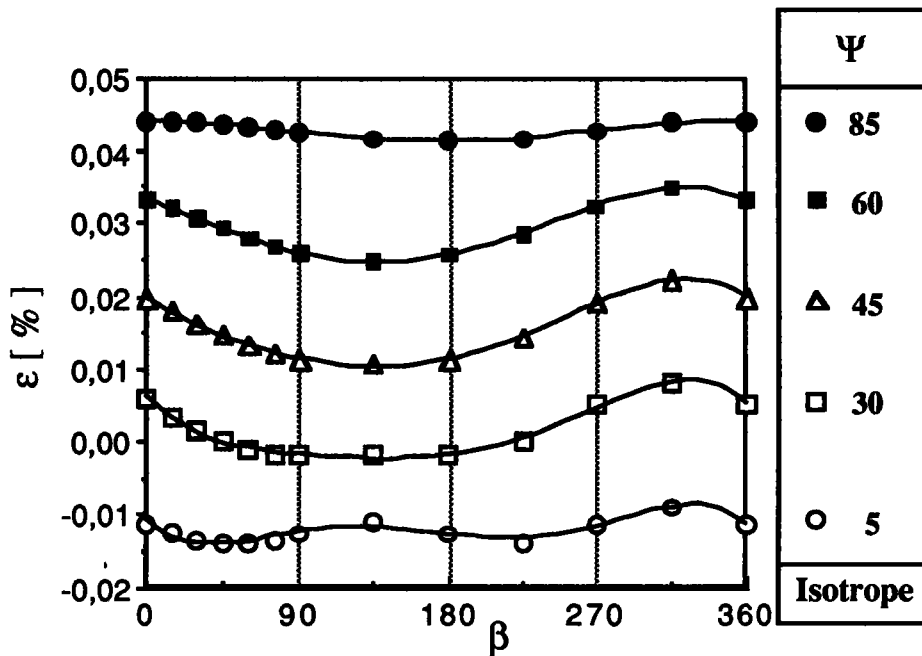


Figure III-9 : Evolution de la déformation $\varepsilon_{\varphi\psi}$ en fonction de la rotation β autour de la direction de mesure pour les plans (211) à φ et ψ donnés.

III.5. Influence d'une texture morphologique

Nous avons supposé jusqu'à présent que les constituants étaient sphériques. Une forme différente des grains peut également introduire des hétérogénéités au niveau des contraintes internes du second ordre (§ II.2.1). L'introduction d'une forme particulière pour les constituants modifie le comportement du tenseur d'interaction T^{II} ; isotrope dans le cas de sphères, ce tenseur est anisotrope pour toute autre morphologie.

Nous étudions l'évolution des déformations internes lors d'un essai de traction simple dans le domaine élastique ($\Sigma_{11} = 100 \text{ MPa}$) pour deux formes différentes des constituants. Dans le premier cas, les ellipsoïdes sont dix fois plus longues dans la direction de traction ($a=10, b=c=1$), dans le second, la dimension suivant l'axe de traction est dix fois plus faible ($a=1, b=c=10$). Les grains possèdent tous la même forme et la même orientation morphologique. L'orientation cristallographique du monocristal constituant le grain est aléatoire.

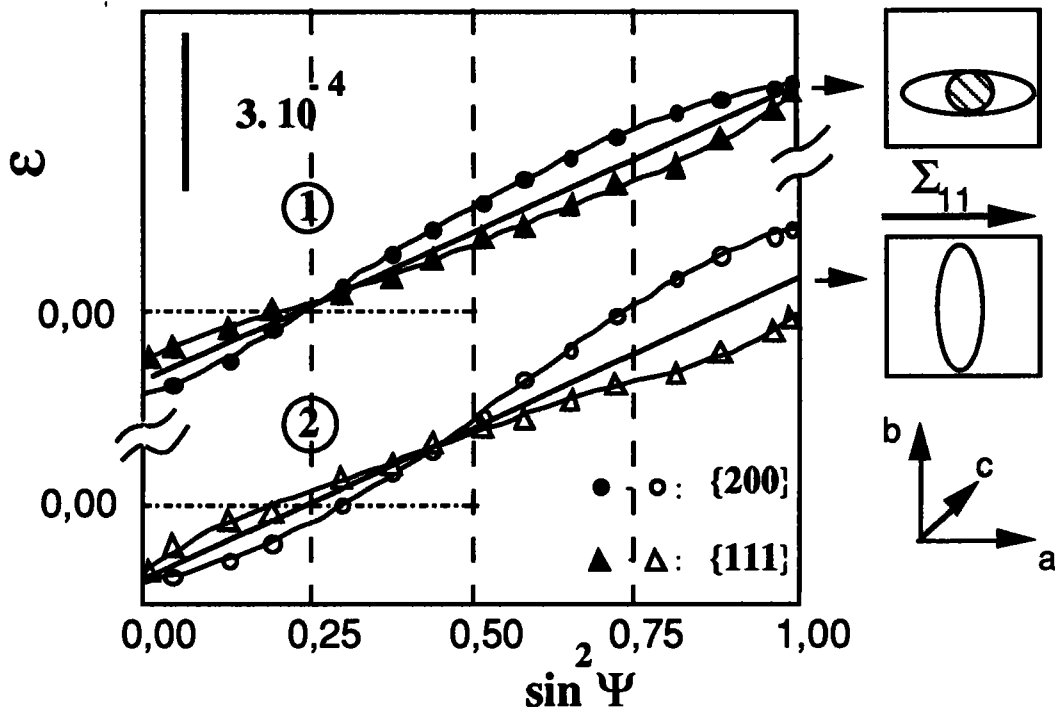


Figure III-10 : Evolution des courbes $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2 \Psi)$ pour deux types de morphologie : (1) - $a=10, b=1, c=1$; (2) - $a=1, b=10, c=10$.

L'évolution des courbes $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2 \Psi)$ est présentée sur la figure III-10. Même pour des familles de plan du type $\{h00\}$ et $\{hhh\}$, le comportement de ces courbes n'est plus linéaire. Les courbes de cette figure montrent, pour $a=10$ et $b=c=1$, une augmentation de l'anisotropie pour certains angles Ψ , notamment proche de 0° et 70° , et une diminution de celle-ci pour des angles proches de 90° , soit dans la direction longue de l'ellipsoïde où on se rapproche des constantes élastiques mécaniques isotropes. La figure III-10 montre également l'évolution de la déformation pour des grains de forme $a=1, b=c=10$. Les mêmes conclusions sont valables pour les familles de plans $\{h00\}$ et $\{hhh\}$. Au niveau de l'anisotropie, la diminution est sensible pour $\Psi=0$, soit suivant l'axe long de l'ellipsoïde et l'augmentation se produit dans la direction de traction, soit suivant les axes courts.

En présence de texture morphologique, on observe une non linéarité des familles de plans $\{h00\}$ et $\{hhh\}$ et donc une augmentation des hétérogénéités suivant l'axe court des cristallites et une diminution suivant les axes longs. Cette remarque est également valable pour des familles de plans d'autres indices.

III.6. Conclusions

Le calcul autocohérent élastique représente une solution exacte dans le cas d'un matériau macroscopiquement isotrope, lorsqu'il est composé de grains parfaitement désordonnés [5]. Il est dans ce cas possible de déterminer les contraintes internes et les constantes élastiques radiocristallographiques à partir d'essais simples.

Il permet en plus de vérifier des caractéristiques démontrées par de nombreux auteurs pour des matériaux présentant une texture cristallographique dans l'hypothèse de Reuss. Nous montrons ainsi que les plans des types $\{ h00 \}$ et $\{ hhh \}$ sont indépendants de la texture cristallographique, mais sont fortement dépendants de la texture morphologique. Un tel effet morphologique n'a jamais été mis en évidence, sans doute masqué par la présence simultanée des deux phénomènes qui accentuent les non linéarités. Nous avons également matérialisé l'influence de la rotation propre autour de la normale de mesure responsable de la sensibilité à la texture. Les courbes sinusoidales obtenues dépendent à la fois du plan de la famille $\{ hkl \}$ et des angles de mesure φ et ψ .

Ce modèle permet ainsi de déterminer le comportement, dans un premier temps élastique, de matériaux classiques monophasés ou polyphasés et de matériaux composites dont la modélisation serait moins onéreuse que la fabrication, pour un résultat aléatoire. Cette méthode semble d'un intérêt appréciable pour l'étude des phénomènes physiques modélisés qui conduisent à des comportements particuliers, en dissociant les causes pour observer leurs effets. La recherche de nouveaux matériaux, classiques ou composites, pourrait également être un champ d'application vaste pour ce modèle qui permet de caractériser le comportement de matériaux modèles sans faire appel à la réalisation de prototype.

Ces résultats sont très encourageant avant le calcul des contraintes résiduelles par le modèle autocohérent élastoplastique à partir duquel nous étudierons l'influence de la déformation plastique sur les contraintes résiduelles de deuxième ordre.

Chapitre IV

IV. Plasticité

IV.1. Polycristaux monophasés

IV.1.1. préparation des éprouvettes

IV.1.2. détermination des polycristaux modèles

IV.1.3. contraintes résiduelles

IV.1.4. énergies bloquées

IV.1.5. déformations résiduelles

IV.1.5.1. mesures expérimentales

IV.1.5.2. calculs autocohérents

IV.1.6. conclusions

IV.2. Polycristaux biphasés

IV.2.1. biphasé hypoeutectique

IV.2.1.1. calcul des contraintes résiduelles

IV.2.1.2. calcul autocohérent

IV.2.1.3. contraintes dans la cémentite

IV.2.1.4. loi des $\sin^2 \psi$

IV.2.1.5. conclusions

IV.2.2. traitements de surface

IV.2.2.1. simulation du dédoublement

IV.2.2.2. composantes de déformation E_{i3}^P

IV.2.2.3. influence de la forme des constituants

IV.2.2.4. conclusions

IV.3. conclusions

IV. Plasticité

Le chapitre précédent a permis de montrer la validité du modèle autocohérent en élasticité. Il permet de calculer les contraintes d'ordre I et d'ordre II dues aux hétérogénéités élastiques, ainsi que le comportement macroscopique du matériau. Lorsque le chargement induit une déformation plastique, les hétérogénéités liées à la déformation plastique se superposent aux hétérogénéités du comportement élastique pour donner naissance à des contraintes (déformations) résiduelles.

L'écoulement plastique, dans un grain d'orientation donnée, dépend essentiellement, pour un matériau déterminé, des contraintes appliquées à ce grain et de l'orientation de celles-ci par rapport à la cristallographie des systèmes de glissement. En particulier, pour un polycristal homogène, en prenant chaque grain de manière isolée, un état de contrainte global provoque une déformation plastique différente d'un grain à l'autre, cette différence étant associée à la désorientation relative des grains. Ces grains déformés ne peuvent plus être juxtaposés sans vide ni recouvrement de matière et la continuité du milieu est détruite. Pour que cette continuité soit préservée, la déformation totale (élastique + plastique) doit satisfaire à certaines conditions de compatibilité. A priori, la déformation plastique prise isolément n'est pas compatible et la continuité est assurée par des déformations élastoplastiques additionnelles qui engendrent des contraintes résiduelles. Celles-ci, bien que nulles en moyenne, entraînent certaines propriétés particulières pour le polycristal dont le comportement ne peut plus être considéré comme celui d'un monocristal moyen. La détermination du comportement plastique nécessitera donc en premier lieu, l'évaluation des contraintes internes à partir de la distribution de la déformation plastique.

Masing et Heyn [33] sont les premiers à avoir attribué les contraintes résiduelles à l'orientation des grains du polycristal en parlant de limite d'écoulement suivant l'orientation cristallographique par rapport à la direction de sollicitation. Cette idée est reprise par Greenough [34] à l'aide de la théorie de Taylor [35] pour en donner une explication qualitative. Les contraintes résiduelles ainsi déterminées sont sept fois plus importantes que les contraintes mesurées par diffraction des rayons X pour un essai de traction simple.

L'approche self-consistante de Kröner [5], développée à partir du calcul d'Eshelby [4] qui concerne une inclusion ellipsoïdale déformée plastiquement dans une matrice infinie isotrope, consiste à considérer un grain particulier comme une inclusion et à étudier les interactions entre ce grain et la

matrice infinie, homogène et continue, formée par tous les autres grains, et qui aurait subi uniformément la déformation macroscopique E^P . En supposant que la déformation ε^P est homogène dans le grain, les contraintes dans l'inclusion sont

$$\sigma_{ij} = \Sigma_{ij} + 2\mu(1 - \beta) \left(E_{ij}^P - \varepsilon_{ij}^P \right) \quad \text{avec} \quad \beta = \frac{2(4 - 5\nu)}{15(1 - \nu)} \quad (\text{IV-1})$$

et μ module de cisaillement
 ν rapport de Poisson.

Dans ce modèle, les incompatibilités de la déformation plastique sont accommodées par des déformations additionnelles purement élastiques dans la matrice. En fait, le modèle de Kröner surestime les contraintes internes car l'accommodation doit être élastoplastique. Les difficultés liées à l'introduction d'une accommodation élastoplastique résident dans la définition, à priori inconnue, du comportement élastoplastique du milieu et l'importance des calculs numériques nécessaires [36]. Hutchinson [37] montre l'importance de l'accommodation plastique dans la relaxation des contraintes internes par une méthode itérative. Il détermine ainsi que le module de cisaillement tangent est de l'ordre de μ en début de déformation plastique, et de l'ordre de $\mu/10$ pour une déformation de 3 ou 4 fois la déformation élastique à la limite d'écoulement.

Des études plus récentes sont basées sur un calcul par éléments finis. Noyan et Nguyen [38] utilisent des éléments bidimensionnels au comportement élastoplastique pour calculer les contraintes locales liées à des orientations idéales et ainsi simuler les mesures de déformations résiduelles par diffraction des rayons X. Cette méthode permet d'obtenir les contraintes et déformations résiduelles pour un nombre restreint de grains en déformations et contraintes planes, mais n'inclut ni l'évolution du comportement des cristallites, ni l'évolution de la microstructure. Les contraintes calculées sont de l'ordre du tiers de la contrainte macroscopique imposée.

L'utilisation du modèle autocohérent élastoplastique, dont la théorie est présentée dans le paragraphe (II.3), permet de calculer les contraintes résiduelles en fonction du chargement imposé et de l'évolution de la microstructure (écrouissage local, texture, contraintes internes, ...). Ce calcul tridimensionnel peut être effectué sur tous les types de matériaux monophasés ou multiphasés à partir du comportement des constituants, de la microstructure et des mécanismes de déformation plastique.

Nous étudions dans le premier paragraphe les contraintes résiduelles après une déformation

plastique en traction simple dans un matériau polycristallin monophasé de type cubique centré. Pour évaluer l'influence de la texture, nous effectuons les calculs dans un matériau sans texture cristallographique et dans un matériau possédant une texture de laminage. Dans les deux cas, nous suivons l'évolution des contraintes résiduelles et de l'énergie élastique bloquée. Pour valider le modèle et les contraintes internes calculées, nous effectuons en parallèle des mesures de déformations résiduelles dans un acier doux laminé et un calcul autocohérent élastoplastique pour un matériau modèle aux caractéristiques identiques. Ce calcul permettra également de modéliser l'influence des hétérogénéités élastoplastiques sur l'évolution des courbes $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2\Psi)$ et sur la détermination des contraintes par diffraction des rayons X basée sur la loi des $\sin^2\Psi$.

Le paragraphe suivant permettra de comparer l'influence des hétérogénéités élastoplastiques dans un polycristal monophasé et un polycristal biphasé possédant une phase dure. Nous effectuons les calculs sur un acier hypoeutectoïde du type XC45. Le calcul autocohérent complété par l'application de la solution de l'inclusion dans une matrice permettra de déterminer les contraintes résiduelles dans la phase dure, la cémentite, très difficile à mesurer par diffraction des rayons X.

Le dernier paragraphe a pour but de modéliser de manière quantitative et d'expliquer le dédoublement des courbes $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2\Psi)$ consécutif à des traitements de surface dans un matériau biphasé à partir du modèle simple d'Eshelby-Kröner [4,5]. Nous montrons que ce dédoublement peut également avoir une origine microstructurale en étudiant un matériau biphasé dont la deuxième phase se compose de disques indéformables.

IV.1. Polycristaux monophasés

Les contraintes résiduelles sont fortement dépendantes de l'orientation cristallographique des grains par rapport à la direction de sollicitation. Le modèle autocohérent présente l'avantage de localiser le chargement global imposé au niveau de chaque grain en fonction de son orientation cristallographique, quel que soit le polycristal modèle. Nous pouvons de cette manière étudier les contraintes résiduelles dans les grains d'un matériau macroscopiquement isotrope pour lequel les contraintes du deuxième ordre dues aux hétérogénéités élastiques n'induisent, à priori en moyenne, pas d'anomalies dans la loi des $\sin^2\Psi$.

Pour valider les contraintes calculées, nous effectuons en parallèle des mesures par diffraction des rayons X sur une tôle d'acier doux laminée, et des calculs sur un matériau modèle aux mêmes caractéristiques mécaniques et microstructurales.

Les mesures par diffraction des rayons X sur ce type de matériau présentent des courbes caractéristiques suivant la famille de plans $\{hkl\}$ de diffraction. Bollenrath et Hauk [39] montrent que les courbes $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2\Psi)$ présentent des oscillations autour de $\varepsilon_{\varphi\psi} = 0$ pour les plans $\{211\}$. Pour des plans $\{310\}$, la pente des courbes indique que les contraintes résiduelles moyennes mesurées dans le volume diffractant se manifestent comme des contraintes macroscopiques. Il semble donc que la loi des $\sin^2\Psi$ ne soit plus adaptée en présence de contraintes résiduelles d'origine plastique. De plus, ils montrent par des mesures après abrasion de couches successives que les contraintes sont homogènes suivant l'épaisseur de l'échantillon après un essai de traction simple. Nous pouvons donc espérer obtenir des résultats cohérents à partir d'un calcul tridimensionnel pour la détermination des contraintes résiduelles et de l'énergie élastique bloquée.

IV.1.1. Préparation des éprouvettes

Nous utilisons, pour effectuer les mesures, une tôle d'acier doux laminée IFHR 400 fournie par SOLLAC (Florange 57), dans laquelle nous prélevons des éprouvettes de traction (Figure IV-1) dans le sens de laminage. Les caractéristiques chimiques de l'acier sont données par le tableau IV-1.

Elts	C	Mn	Si	Ti	Al	Cu	Ni	Cr
%	0,011	1,103	0,336	0,122	0,033	0,034	0,033	0,021

Tableau IV-1 : Caractéristiques chimiques de l'acier IFHR 400.

Nous effectuons un recuit de détente pour éliminer les contraintes internes liées à l'histoire de déformation du matériau. Le recuit s'effectue à 600° c pendant 4 heures sous atmosphère contrôlée

(Argon), le refroidissement s'effectue au four pendant 12 heures. Ces éprouvettes subissent ensuite un polissage électrolytique pour nettoyer la surface externe et sont déformées plastiquement en traction simple jusqu'à 1, 5 et 10%.

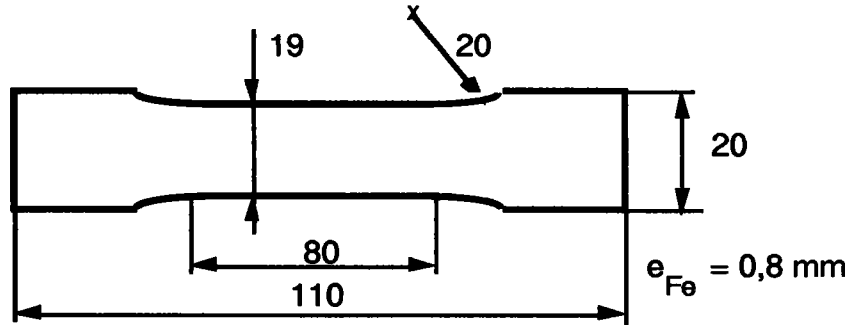


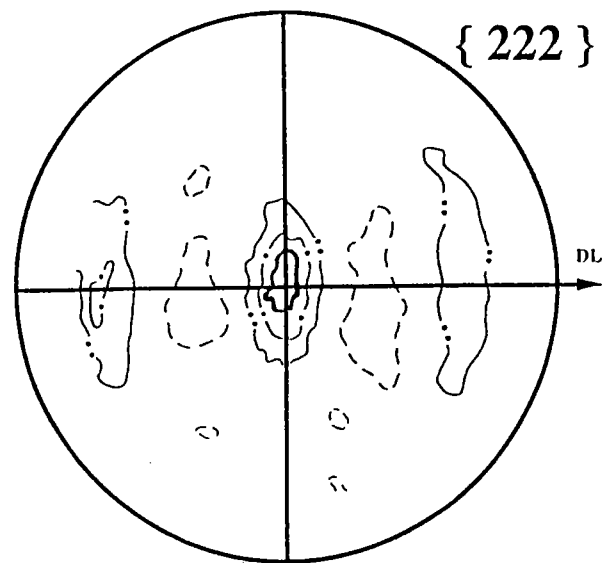
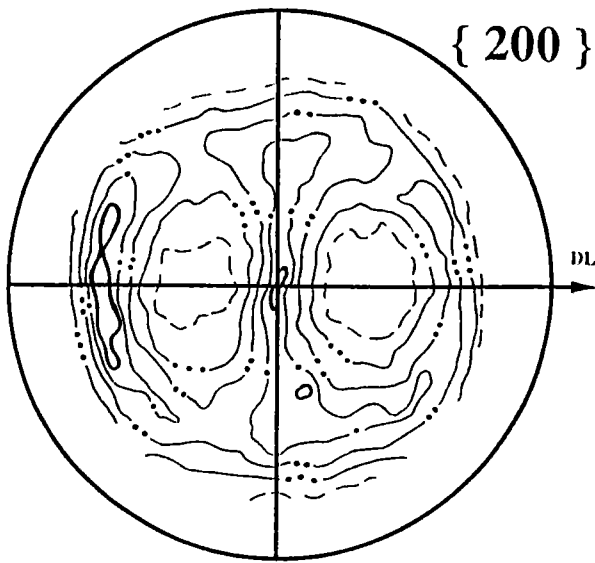
Figure IV-1 : Epreuve de traction.

IV.1.2. détermination des polycristaux modèles

Pour effectuer les calculs, nous utilisons des polycristaux modèles qui possèdent les mêmes caractéristiques mécaniques et microstructurales (texture cristallographique et morphologique) que l'acier expérimental. La texture cristallographique est obtenue à partir de la Fonction de Distribution des Orientations (FDO) de l'acier. Pour son calcul, nous avons effectué sur les éprouvettes après recuit des mesures de figures de pôles par diffraction des rayons X. Cette mesure consiste à relever les intensités de diffraction correspondantes aux angles φ [0, 360] et ψ [0, 70]. Nous avons ainsi mesuré les figures de pôles { 200 }, { 222 }, { 211 } et { 310 } (planche IV-1). Ces figures de pôles permettent de calculer la FDO correspondante par la méthode des harmoniques sphériques [14]. Elle est présentée sur la planche IV-2, et correspond, comme les figures de pôles à des déformations de laminage. Notons cependant, qu'en raison de la position de l'échantillon pour le mesure de texture la direction de laminage correspond à $\varphi_1 = 90^\circ$.

La FDO ainsi déterminée permet de sélectionner 3000 orientations représentatives de la texture effective du matériau par la méthode de M. François [40], présentée en annexe 1.

La planche IV-3 présente les figures de pôles recalculées à partir des grains du polycristal modèle ; une comparaison des planches IV-1 et IV-3 montre une bonne concordance entre les figures de pôles expérimentales et recalculées.



I	200	222	211	310
Min	690	153	280	150
Max	2590	900	3490	810
· - -	1100	210	600	290
- · · -	1410		990	390
- · · -	1720	360	1390	490
- · -	2040	510	1790	590
—	2350	660	2190	690

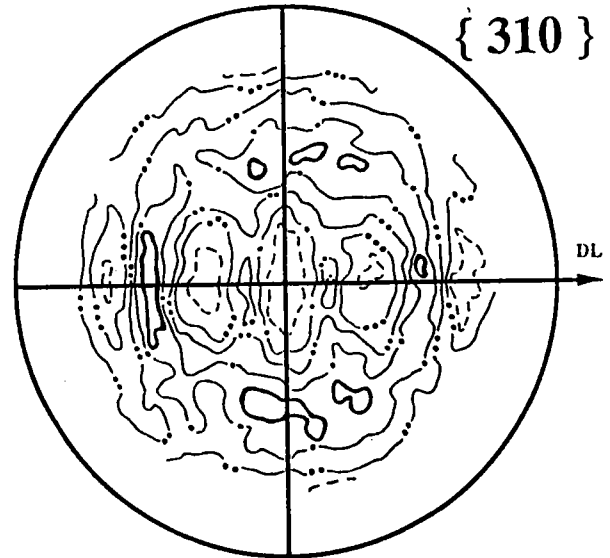
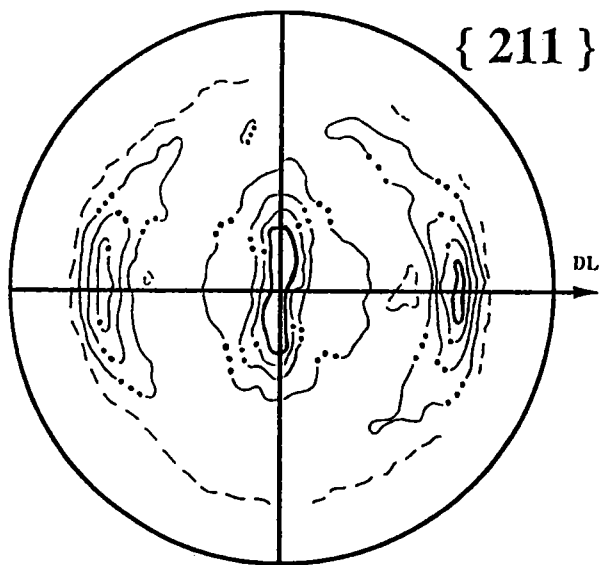


Planche IV-1 : Figures de pôles expérimentales.

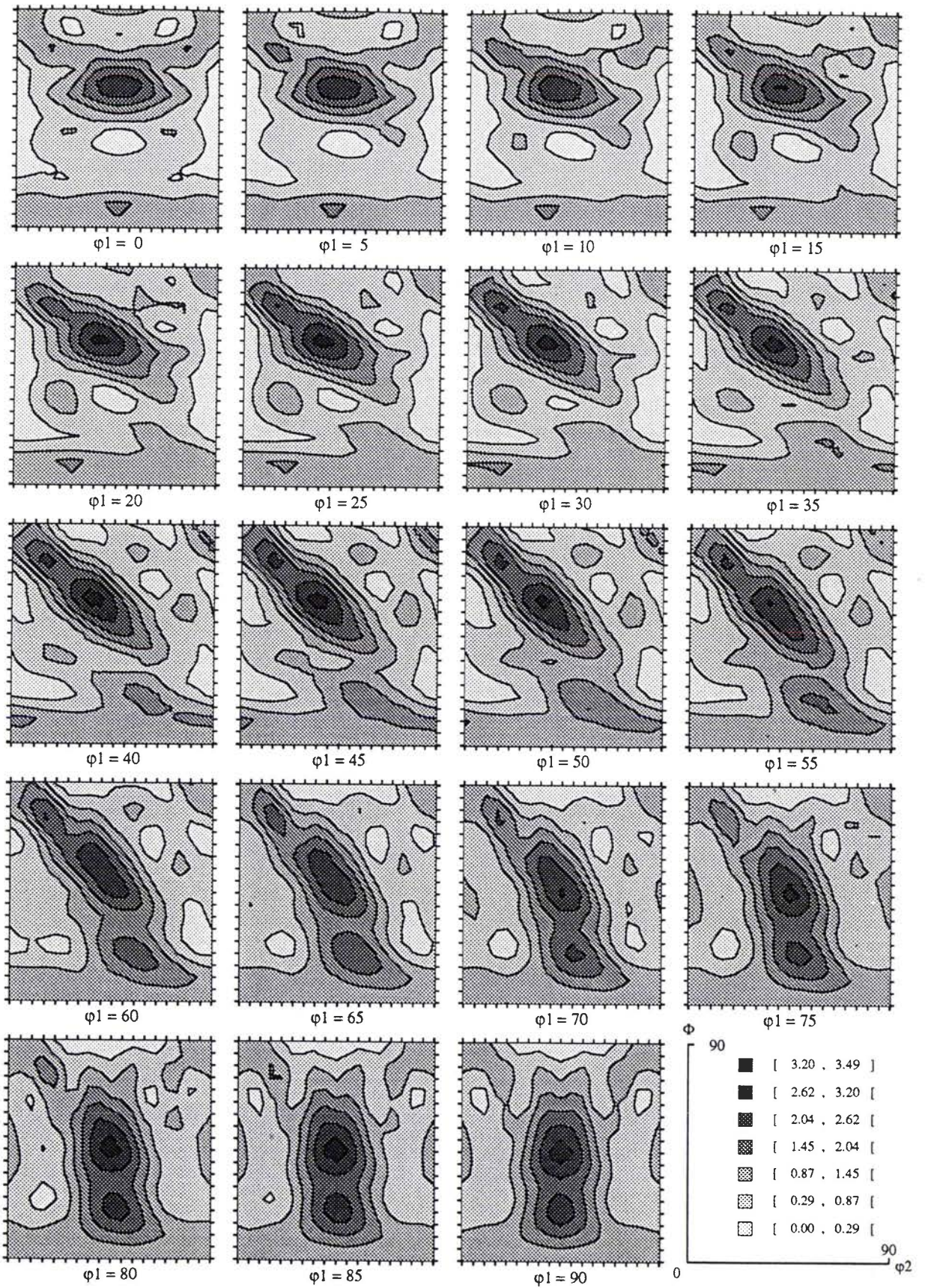
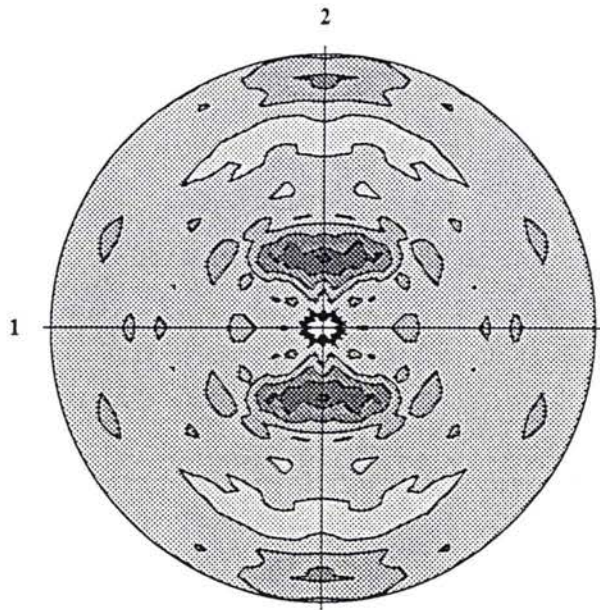
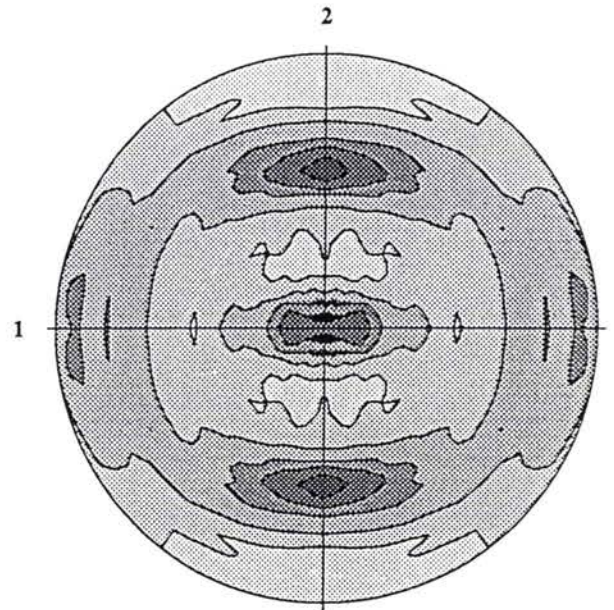


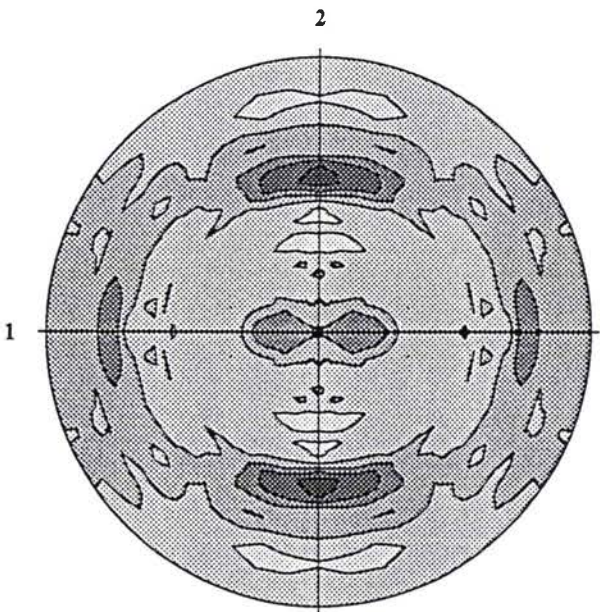
Planche IV-2 : Fonctions de distribution des orientations à ϕ_1 constant.



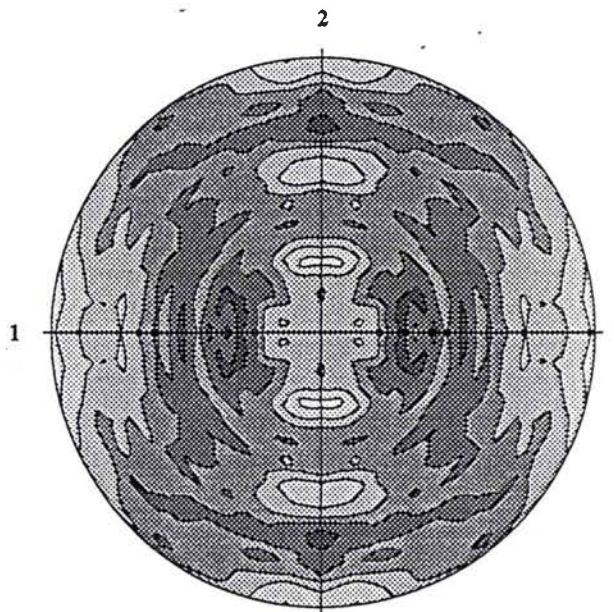
Poles 110



Poles 111



Poles 112



Poles 310

Planche IV-3 : Figures de pôles recalculées à partir du matériau modèle (DL--> 2).

Pour effectuer les calculs, outre l'orientation cristallographique de chaque cristallite, il faut définir les caractéristiques physiques suivantes :

- cissions critiques sur tous les systèmes de glissement
- matrice d'écrouissage
- forme et taille des grains

Pour déterminer la forme et la taille des constituants, nous avons effectué une analyse métallographique. Les observations n'ont pas permis de déceler une forme particulière des grains, nous considérons donc pour les calculs qu'ils sont sphériques. Les constituants ont une taille moyenne d'environ 20 μm , ces tailles faibles permettront d'obtenir des volumes diffractants composés de suffisamment de cristallites pour valider les mesures.

	C11	C12	C44	τ_0	H_f	A	Systèmes de glissement
Acier	242	144	118	80	250	1.1	(110)[11 $\bar{1}$] (112)[111] $\bar{}$
	(GPa)			(MPa)			

Tableau IV-2 : Caractéristiques physiques des polycristaux modèles.

La courbe de traction expérimentale, figure IV-2 permet de déterminer les cissions critiques égales sur les systèmes de glissement et un taux d'écrouissage du polycristal. Ce taux permet de déterminer un terme faible (H_f = interactions entre systèmes colinéaires et coplanaires) et fort (H_F sur les autres systèmes) de la matrice d'écrouissage pour le calcul autocohérent [13]. Un calcul élastoplastique, pour le matériau soumis à un essai de traction, permet de retrouver sensiblement les mêmes courbes de traction, ou, dans le cas contraire, de modifier les paramètres pour approcher les courbes expérimentales. Le comportement élastique des grains de l'acier doux est caractérisé par les constantes élastiques du fer pur. L'ensemble des caractéristiques physiques est donné dans le tableau IV-2, $A=H_F/H_f$.

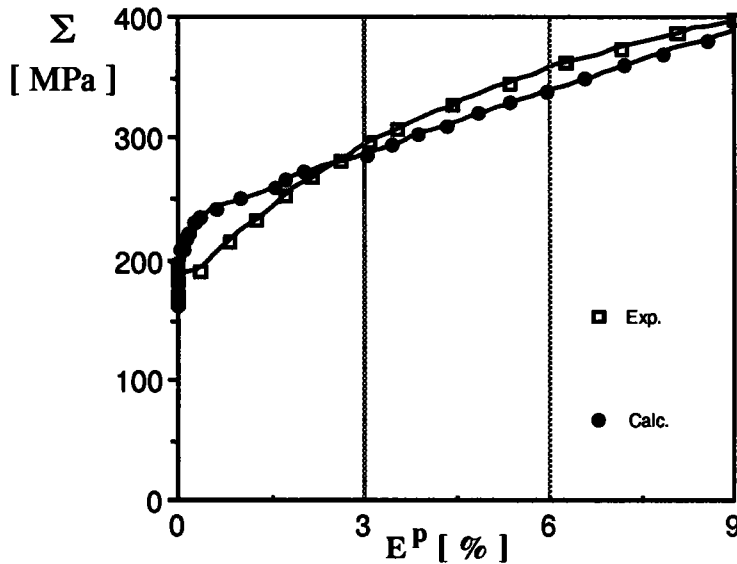


Figure IV-2 : Courbes de traction expérimentale et simulée pour l'acier IFHR 400.

IV.1.3. contraintes résiduelles

Nous considérons un polycristal composé de 3000 cristallites d'orientation aléatoire, de fraction volumique identique et de forme sphérique dont les caractéristiques sont données par le tableau IV-2. Nous simulons des essais de traction simple jusqu'à des déformations équivalentes de 10% pour étudier après décharge les contraintes résiduelles dans les grains d'orientations particulières par rapport à la direction de sollicitation. Nous considérons que jusqu'à cette déformation l'influence de la texture induite est négligeable.

La représentation de la direction de traction sur une figure de pôles inverses permet de l'orienter par rapport au repère lié au cristallite, c'est-à-dire de localiser la direction de traction par rapport aux normales aux plans $\{ hkl \}$. Dans le triangle standard, nous sélectionnons les cristallites possédant une de ces directions caractéristiques (001), (011) et (111) suivant la direction de traction et traçons les courbes $\sigma_{ij} = f(E^P)$ pour les termes diagonaux du tenseur des contraintes résiduelles.

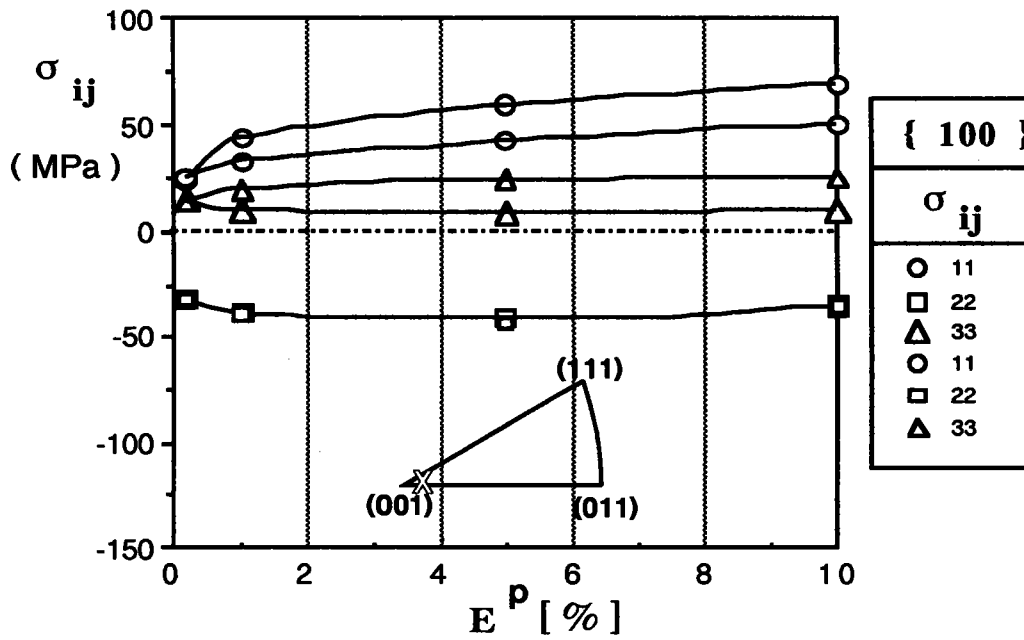


Figure IV-3a : Evolution des contraintes résiduelles pour des cristallites dont les normales { 100 } sont parallèles à la direction de traction.

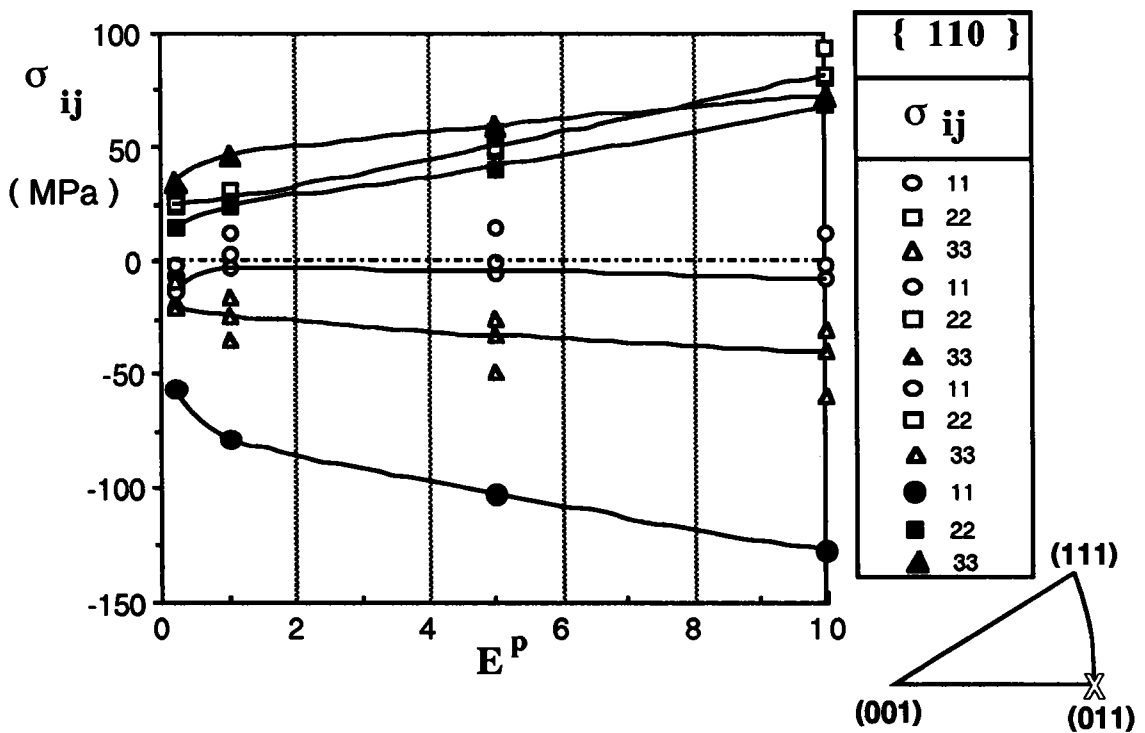


Figure IV-3b : Evolution des contraintes résiduelles pour des cristallites dont les normales { 110 } sont parallèles à la direction de traction.

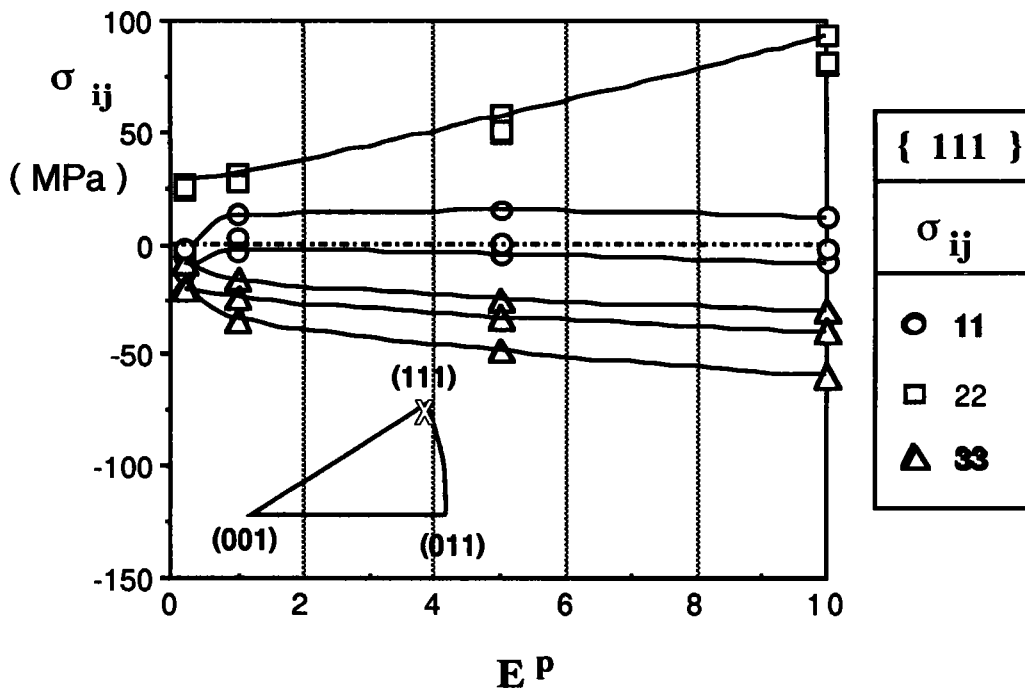


Figure IV-3c : Evolution des contraintes résiduelles pour des cristallites dont les normales { 111 } sont parallèles à la direction de traction.

La figure IV-3a montre l'évolution des contraintes résiduelles pour des grains possédant une direction (001) parallèle à la direction de sollicitation. Les contraintes σ_{11} positives correspondent à un écrouissage important de ces grains.

Les contraintes σ_{11} sont proches de zéro pour les cristallites possédant une normale (111) suivant l'axe de traction, figure IV-3c. L'écrouissage de ces grains est proche de l'écrouissage du polycristal réel.

Les contraintes σ_{11} sont soit proches de zéro, soit négatives pour les cristallites possédant une direction (011) dans la direction de sollicitation et correspondent à un écrouissage inférieur ou égal à celui du polycristal moyen, figure IV-3b.

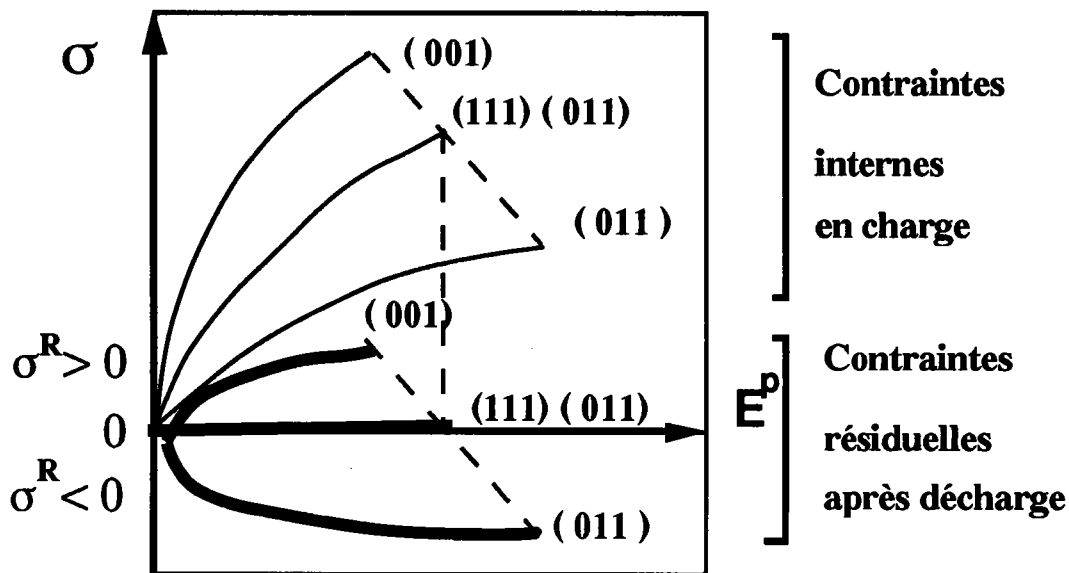


Figure IV-4 : Evolution des contraintes internes (traits fins) et résiduelles (traits gras) suivant l'orientation des grains par rapport à l'axe de traction.

Si l'on exclut l'évolution des autres composantes, il semble que l'écroissage soit maximal pour les grains dont l'axe de traction correspond aux normales aux plans (001), moyen pour les normales aux plans (111) et soit moyen, soit minimal pour les normales aux plans (011). Ces observations correspondent, bien qu'elles soient effectuées dans un polycristal, aux observations de Jaoul [41] dans des monocristaux de fer armco. En effet, les consolidations observées dans les monocristaux cubiques centrés sont maximales pour des cristaux d'orientations (001) et (111). Elles sont dispersées entre le maximum et le minimum pour les cristaux en traction suivant un axe (011). Ces observations sont résumées sur la figure IV-4 qui présente l'évolution des contraintes internes et résiduelles en fonction de la déformation plastique et de l'orientation des grains par rapport à l'axe de sollicitation.

IV.1.4. énergie bloquée

A partir des contraintes et déformations locales calculées dans chaque grain, nous pouvons calculer l'énergie élastique bloquée du polycristal pendant le chargement (§ II.4.3). La figure IV-5 montre l'évolution caractéristique de la fraction d'énergie bloquée F en fonction de la déformation plastique équivalente. La courbe montre que jusqu'à la position du maximum pour $EP = 0,2\%$, sensiblement

30 % du travail de déformation plastique fourni est transformée en énergie élastique . Bien que la courbe de l'énergie élastique soit croissante, l'apparition du glissement dévié diminue ensuite le rapport entre énergie élastique et énergie fournie par le chargement. La courbe de la figure IV-5 est conforme aux résultats expérimentaux de Chrysochos [16]. Contrairement aux modèles phénoménologiques, le modèle autocohérent est capable de déterminer l'évolution de l'énergie élastique dans les grains du polycristal en fonction du chargement imposé et du taux de déformation plastique.

L'énergie bloquée dans chaque grain est une grandeur scalaire et ne dépend donc que des champs de contraintes et de déformations élastiques, qui sont eux-mêmes dépendants du trajet de déformation plastique et de l'orientation cristallographique. L'énergie bloquée, de la même manière que la texture peut être représentée sous la forme de figures de pôles ou de fonction de distribution de l'énergie bloquée dans l'espace d'Euler. Pour les figures de pôles, le principe est le même que pour une texture, mais nous représentons l'énergie bloquée moyenne du volume diffractant au lieu de l'intensité diffractée. De même, pour la fonction de distribution de l'énergie bloquée nous représentons l'énergie bloquée moyenne correspondant aux grains qui occupent la même zone dans l'espace d'Euler.

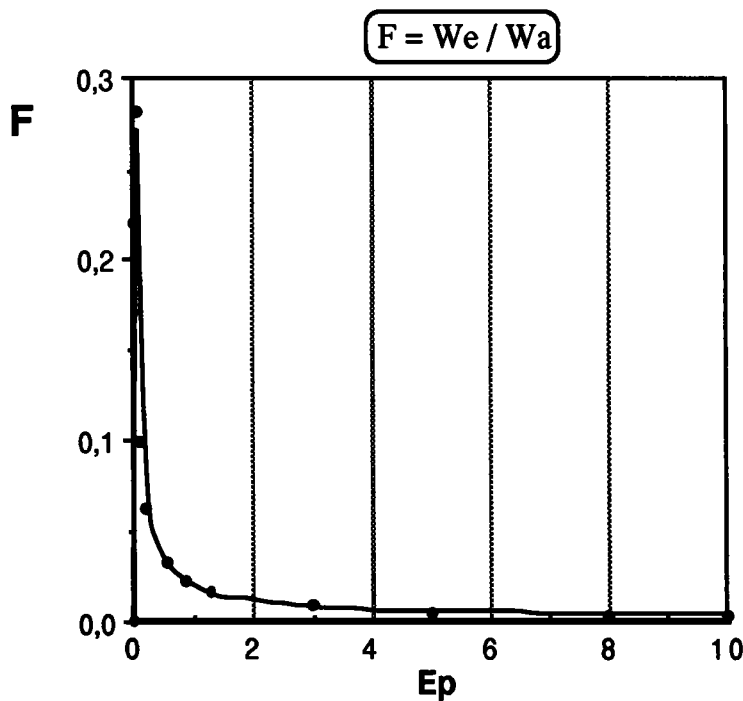


Figure IV-5 : Fraction d'énergie bloquée globale calculée pour le polycristal modèle représentant l'acier doux IFHR 400.

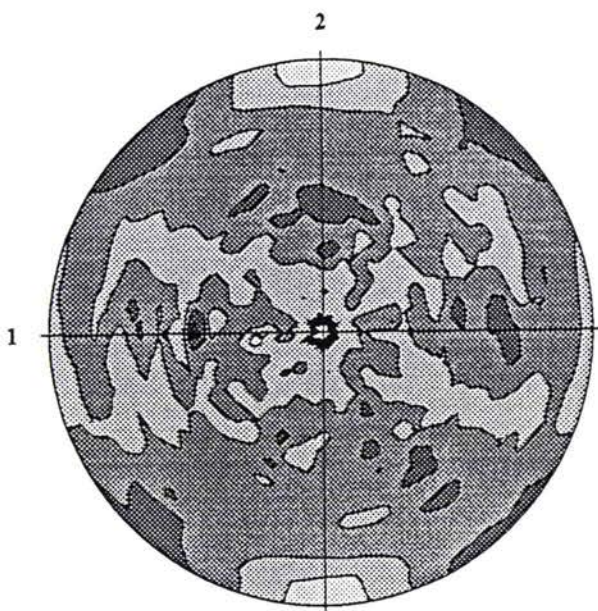
figures de pôles d'énergie bloquée

La planche IV-4 montre les figures de pôles d'énergie bloquée dans les grains du matériau modèle sans texture après une déformation plastique en traction simple de 5%. Elle montre une symétrie de rotation autour de la direction de traction (matérialisée 2). L'énergie bloquée maximale sur la figure de pôles {110} est observée dans la direction de traction. Cette orientation correspond à des directions de glissement [111] en position de glissement privilégié. C'est donc l'orientation cristallographique des systèmes de glissement par rapport à la direction de déformation macroscopique qui conditionne le développement de l'énergie élastique bloquée dans les grains.

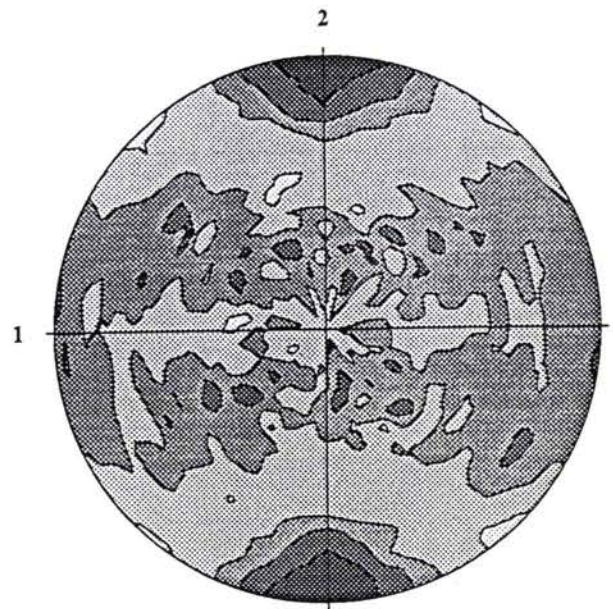
La planche IV-5 présente les figures de pôles d'énergie bloquée d'un matériau possédant une texture de laminage. Ces figures ne sont pas fondamentalement différentes des précédentes. Pour constituer le matériau modèle, nous avons sélectionné 3000 grains parmi les orientations d'une FDO de texture ; nous obtenons ainsi des orientations aléatoires et des grains en plus grand nombre faisant partie des composantes de texture. Dans la mesure où nous considérons la valeur moyenne de l'énergie associée à une position de la figure de pôles, l'effet de la texture est faible. Pour des textures de fibres ou des textures très marquées, on peut attendre une influence de la texture beaucoup plus importante.

fonction de distribution d'énergie bloquée

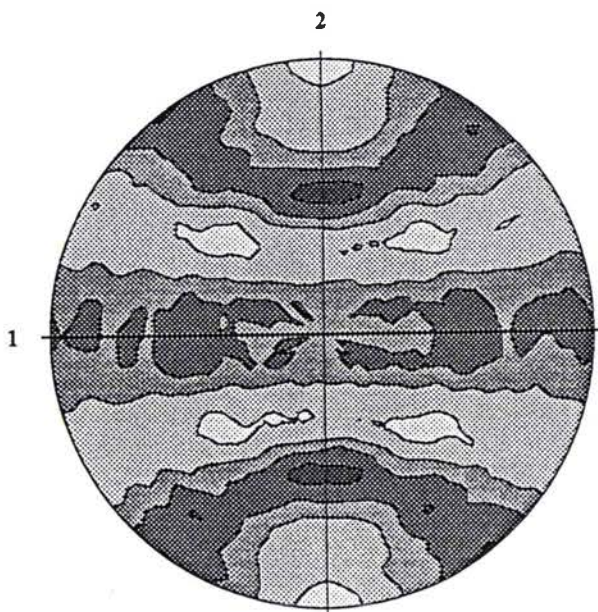
Les planche IV-6 et IV-7 présentent les fonctions de distribution de l'énergie bloquée pour le matériau sans texture et pour le polycristal modèle représentant l'acier IFHR400. Elles ne permettent pas davantage d'observer une influence de la texture présente dans le matériau. La similitude de certaines composantes de texture de traction et de laminage pourrait expliquer les recouvrements entre FDO de texture et d'énergie bloquée.



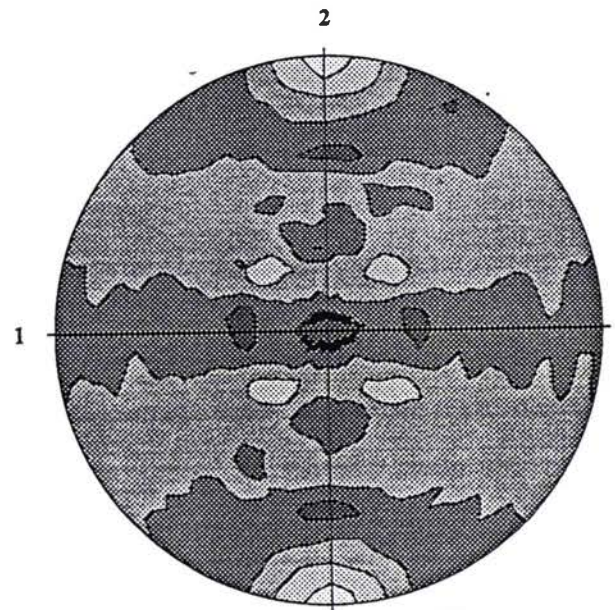
Poles 200



Poles 110



Poles 111



Poles 112

Planche IV-4 : Figures de pôles d'énergie bloquée moyenne d'un matériau sans texture après traction simple ($E^P = 5\%$ suivant DL --> 2).

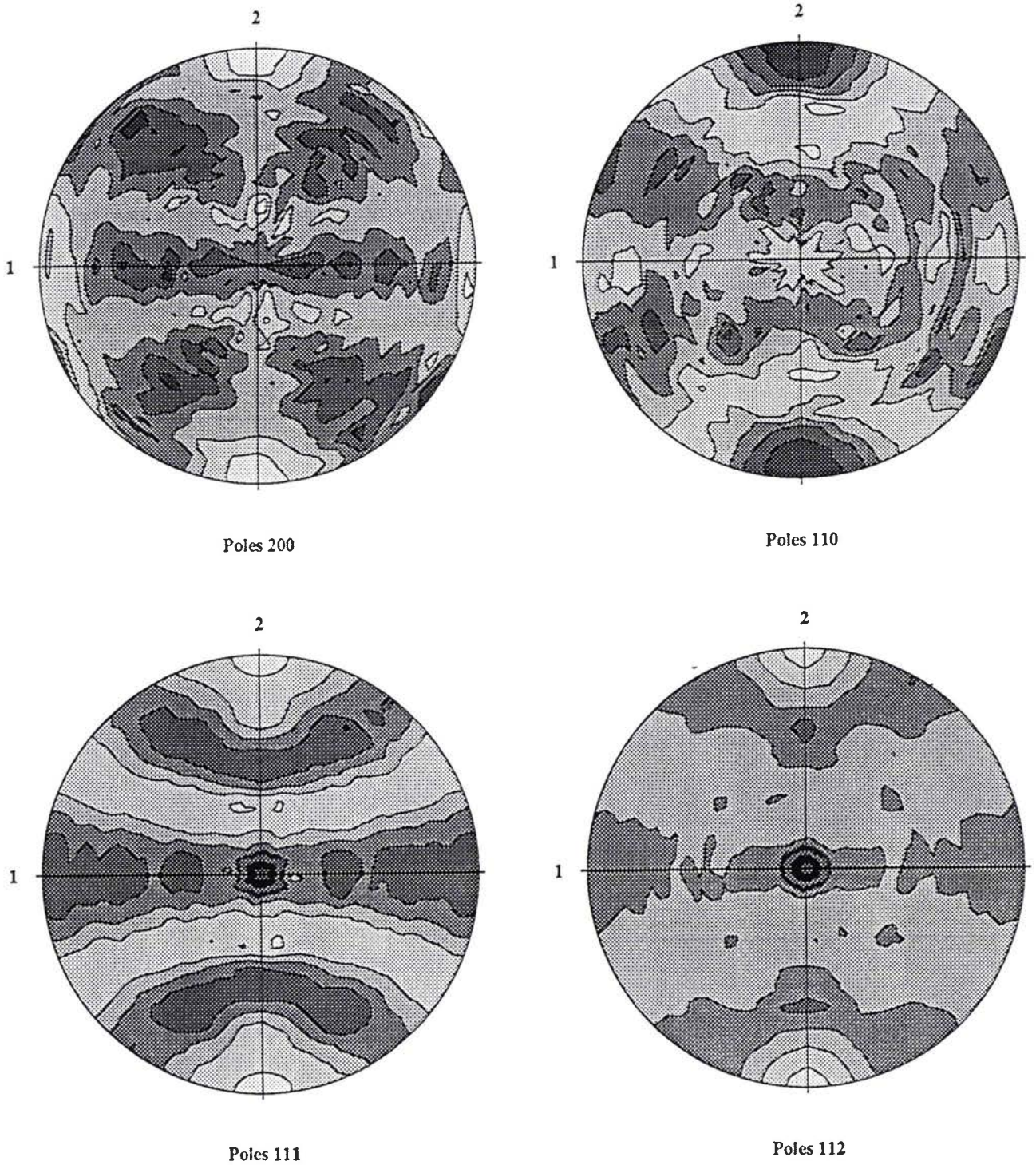


Planche IV-5 : Figures de pôles d'énergie bloquée moyenne calculée pour l'acier IFHR 400 texturé après traction simple ($E^P = 5\%$ suivant DL $\rightarrow 2$).

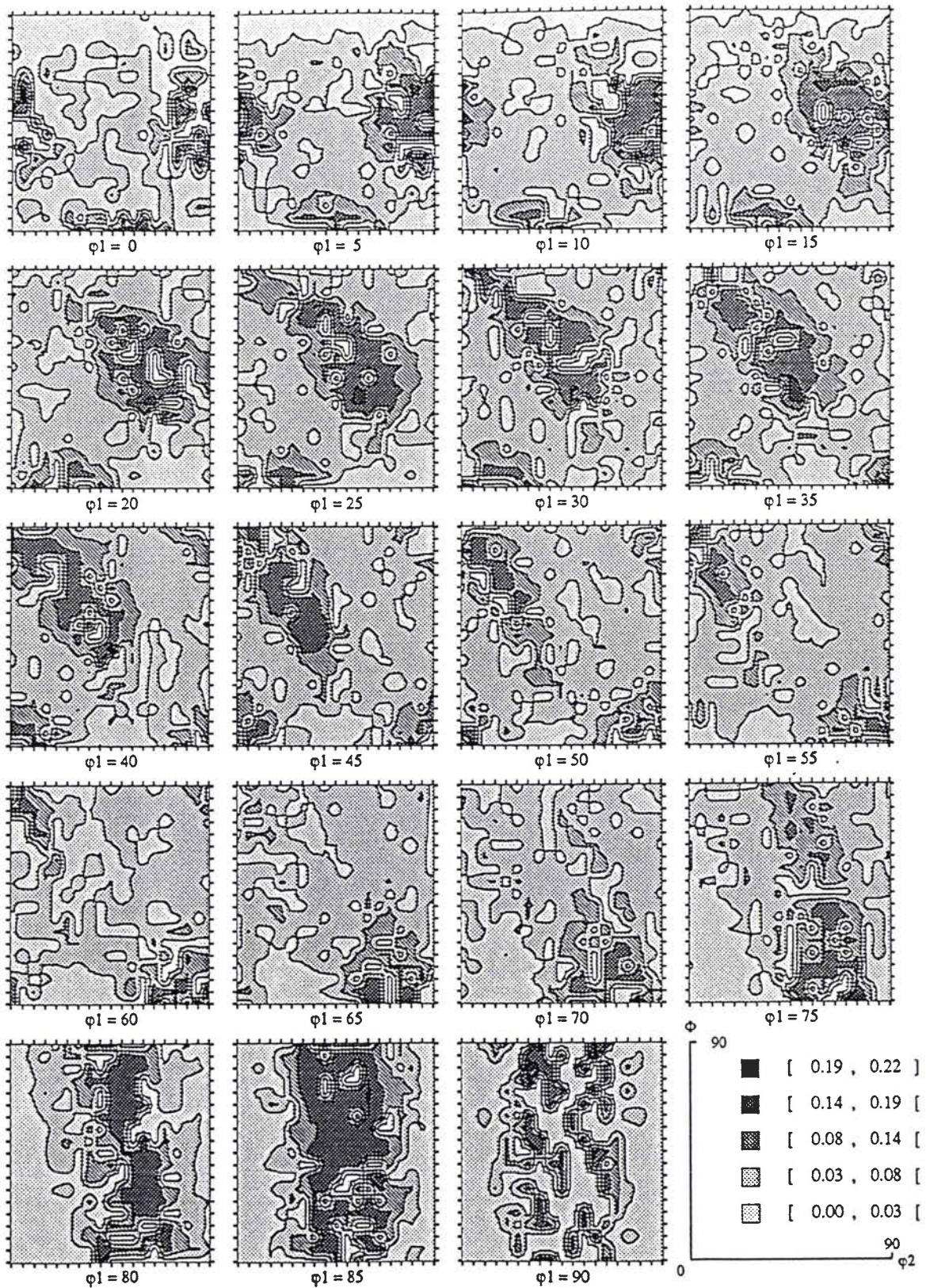


Planche IV-6a: Fonction de distribution d'énergie bloquée calculée pour un matériau sans texture après traction simple ($E^P = 5\%$ suivant DL).

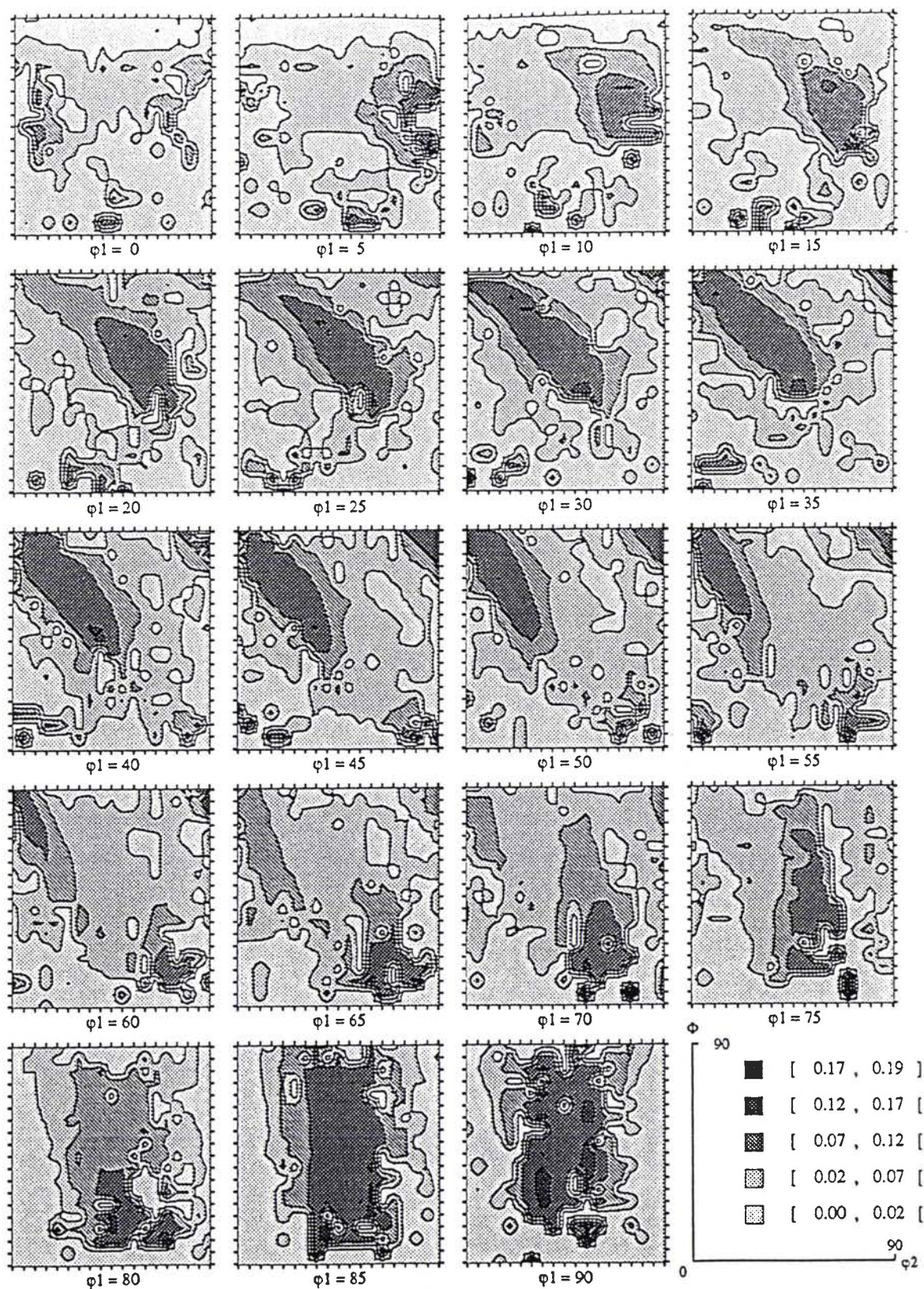


Planche IV-6b : Fonction de distribution d'énergie bloquée calculée pour l'acier IFHR 400 texturé après traction simple ($E^P = 5\%$ suivant DL).

IV.1.5. déformations résiduelles.

IV.1.5.1. mesures par diffraction des rayons X

Les mesures de déformations élastiques résiduelles sont effectuées au laboratoire de sciences des matériaux (Werkstoffwissenschaften FB15) de l'université de Saarbrücken (Allemagne) sur un goniomètre classique en mode Ψ (les rotations Ψ et 2θ sont découplées). L'acquisition des données s'effectue à l'aide d'un détecteur au Germanium qui enregistre tout le spectre énergétique de diffraction. Ce spectre permet d'obtenir la position du maximum de diffraction en 2θ qui conduit aux courbes de déformation en fonction de $\sin^2\Psi$.

Les mesures de déformations par rayons X, pour l'analyse de contraintes, sont optimales pour des angles 2θ élevés. Nous avons donc choisi les rayonnements les plus pénétrants pour diminuer l'effet de la surface, tout en conservant des angles 2θ élevés qui permettent d'observer des anomalies d'amplitude suffisante. Ainsi, nous étudions les déformations normales aux familles de plans $\{ 211 \}$ à l'aide d'un rayonnement de chrome ($2\theta = 154^\circ$) et $\{ 310 \}$ d'un rayonnement de cobalt ($2\theta = 160^\circ$) pour l'acier. Les profondeurs de pénétration étant de $11 \mu\text{m}$ pour le cobalt et $8 \mu\text{m}$ pour le chrome.

		Déformation plastique			2θ	λ
$\{ 211 \}$	Recuit	1 %	5 %	10 %	154°	Cr : $2,29 \text{ \AA}$
$\{ 310 \}$	Recuit	1 %	5 %	10 %	160°	Co : $1,7902 \text{ \AA}$

Tableau IV-3 : Plan des mesures effectuées.

Les paliers correspondant aux bandes de Luders qui apparaissent au début de la déformation semblent montrer que les échantillons ont été suffisamment recuits. Les courbes de déformations montrent toutefois qu'il subsiste des contraintes résiduelles ; celles-ci ne semblent pas affecter de manière significative la déformation plastique en traction simple. Les conditions de mesures effectuées sont résumées dans le tableau IV-3.

Les mesures consistent à déterminer l'angle de diffraction 2θ maximum, dans une direction φ et un angle d'inclinaison Ψ inférieur à 75° de l'échantillon, qui permet de calculer la distance interréticulaire d .

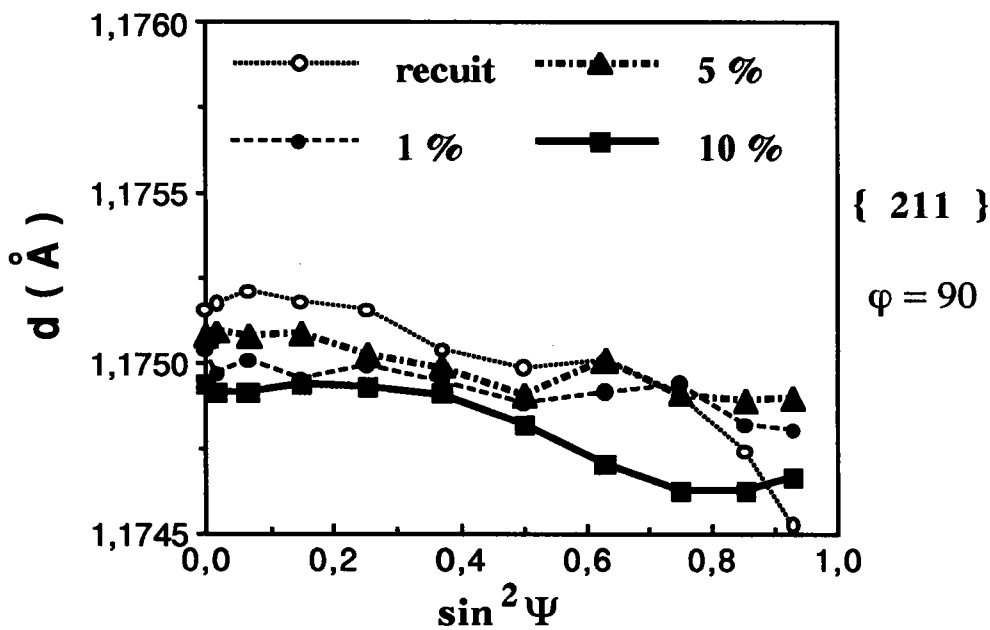
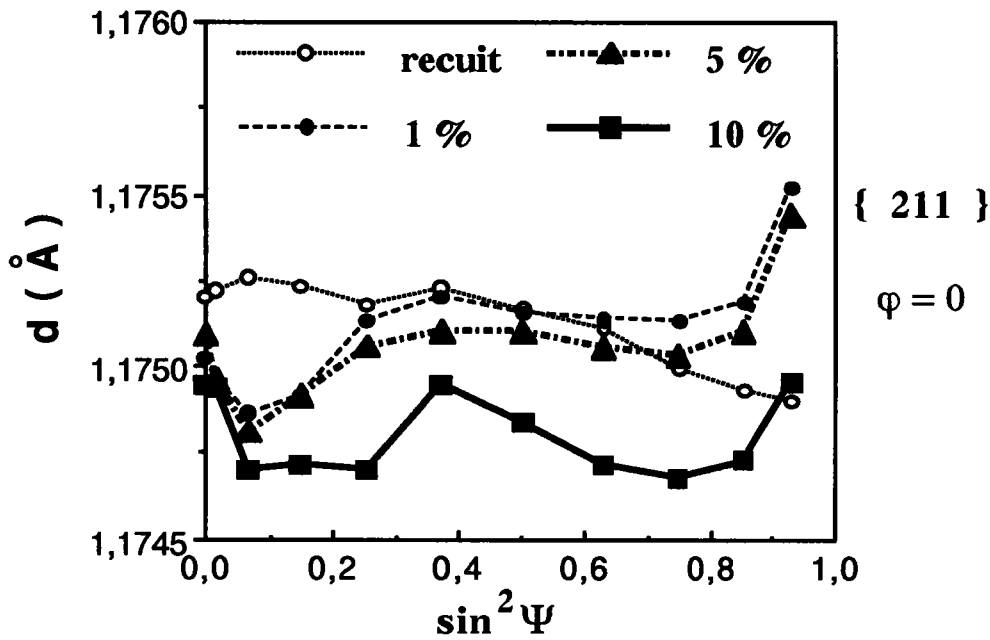


Figure IV-6 : Distance interréticulaire d mesurée entre plans { 211 } en fonction de la déformation plastique en traction simple pour des tôles laminées d'acier doux IFHR400.

Les figures IV-6 et IV-7 montrent l'évolution de la distance interréticulaire d en fonction de $\sin^2 \Psi$ pour les familles de plans { 211 } et { 310 } dans la direction de traction ($\varphi = 0^\circ$) et dans la direction transverse ($\varphi = 90^\circ$). Les taux de déformations plastiques équivalentes en traction simple

sont de 1, 5 et 10%. La forme générale des courbes est caractéristique pour des tôles laminées recuites ayant subi une déformation plastique en traction simple. Les amplitudes maximales des oscillations pour un taux de déformation de 10%, sont d'environ 4.10^{-4} pour des plans $\{ 211 \}$ et d'environ 7.10^{-4} pour des plans $\{ 310 \}$.

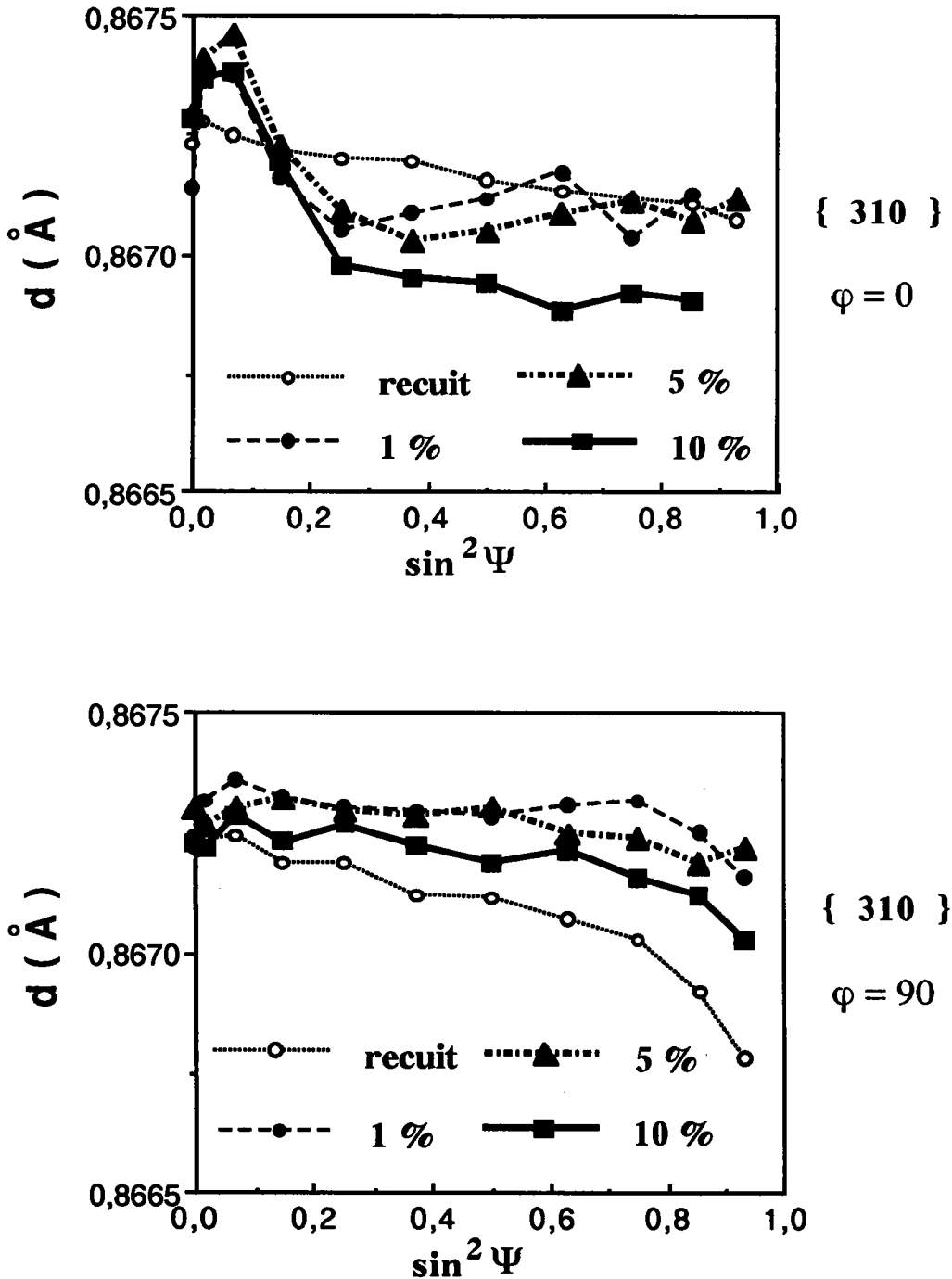


Figure IV-7 : Distance interréticulaire d mesurée entre plans $\{310\}$ en fonction de la déformation plastique en traction simple pour des tôles laminées d'acier doux IFHR400.

IV.1.5.2. calcul autocohérent.

Le calcul autocohérent, dans la mesure où la description physique des phénomènes de glissement et des matériaux est suffisante, permet de calculer l'évolution de tout type de matériau à l'échelle microscopique et macroscopique en fonction de la microstructure et du chargement imposé.

La connaissance de l'orientation de chaque grain et de son champ de déformation, nous permet de simuler les courbes de déformations, $\varepsilon = f(\sin^2 \Psi)$, en calculant les angles φ et ψ correspondants aux normales $\{hkl\}$. Nous pouvons ainsi simuler les courbes de déformations mesurées par diffraction des rayons X en reproduisant le volume diffractant.

matériau sans texture

Nous considérons un polycristal composé de 3000 cristallites d'orientation aléatoire, de fraction volumique identique et de forme sphérique. Les caractéristiques monocristallines sont données par le tableau IV-2. Nous simulons des essais de traction simple jusqu'à des déformations plastiques équivalentes de 10%.

Le comportement élastique est macroscopiquement isotrope et seules les hétérogénéités dues à l'anisotropie de la déformation plastique pourront, à priori, donner lieu à des anomalies par rapport au comportement macroisotrope. Nous considérons que jusqu'à 10 % de déformation plastique l'influence de la texture induite est négligeable.

La figure IV-8 présente les résultats obtenus pour les plans de diffraction des familles $\{211\}$ et $\{310\}$ dans la direction de déformation. Chaque point de la courbe représente la déformation normale moyenne des grains compris à l'intérieur d'une bande en $\sin^2 \Psi$ et de 10° en φ . Cette figure met en évidence l'anisotropie de la déformation plastique liée à l'orientation cristallographique des systèmes de glissement par rapport à la direction de chargement. On observe une courbe pratiquement linéaire proche de zéro pour les plans $\{211\}$ et une courbe de pente négative importante pour les plans $\{310\}$. Nous reviendrons plus tard sur l'analyse des contraintes résiduelles par la loi des $\sin^2 \Psi$ relative à ces courbes.

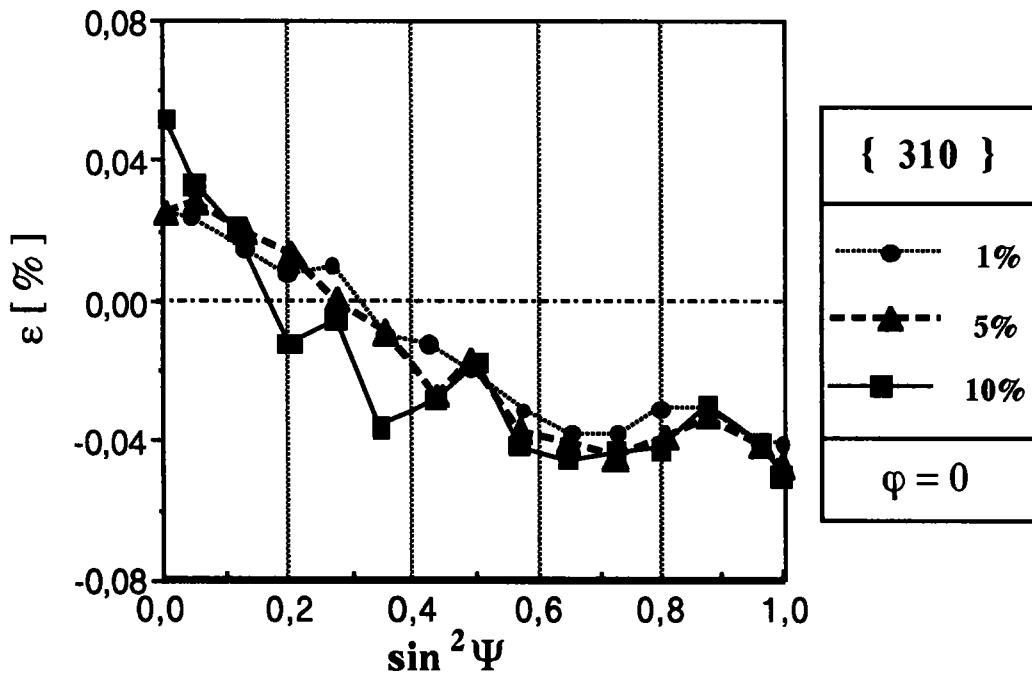
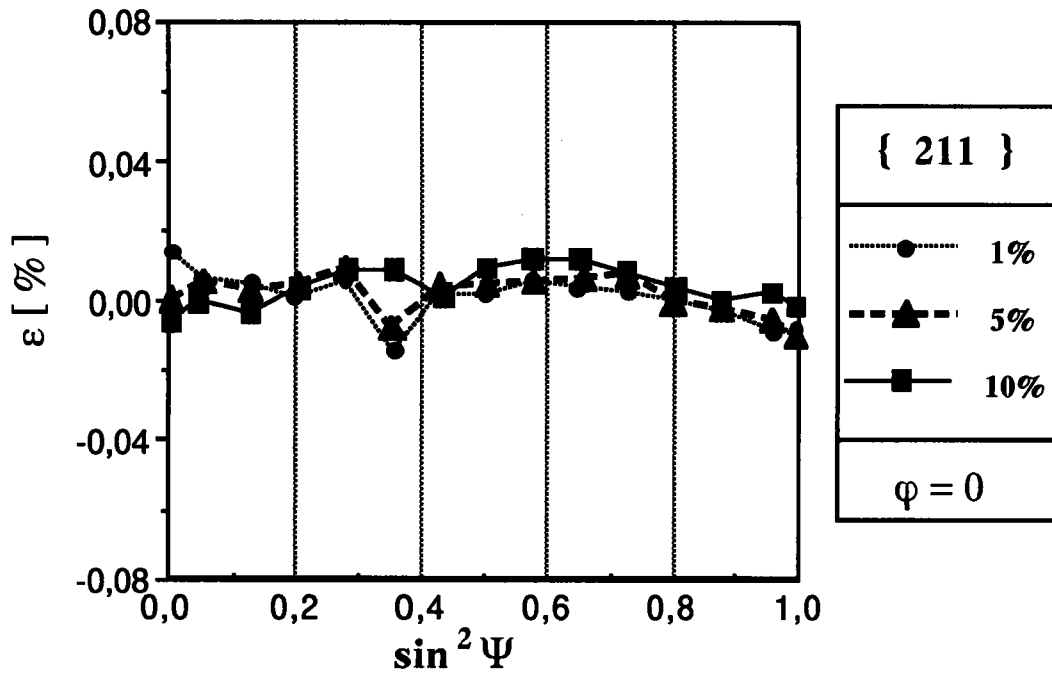


Figure IV-8 : Evolution calculées des courbes $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2 \Psi)$ dans la direction de traction en fonction de la déformation plastique en traction simple pour des matériaux sans texture.

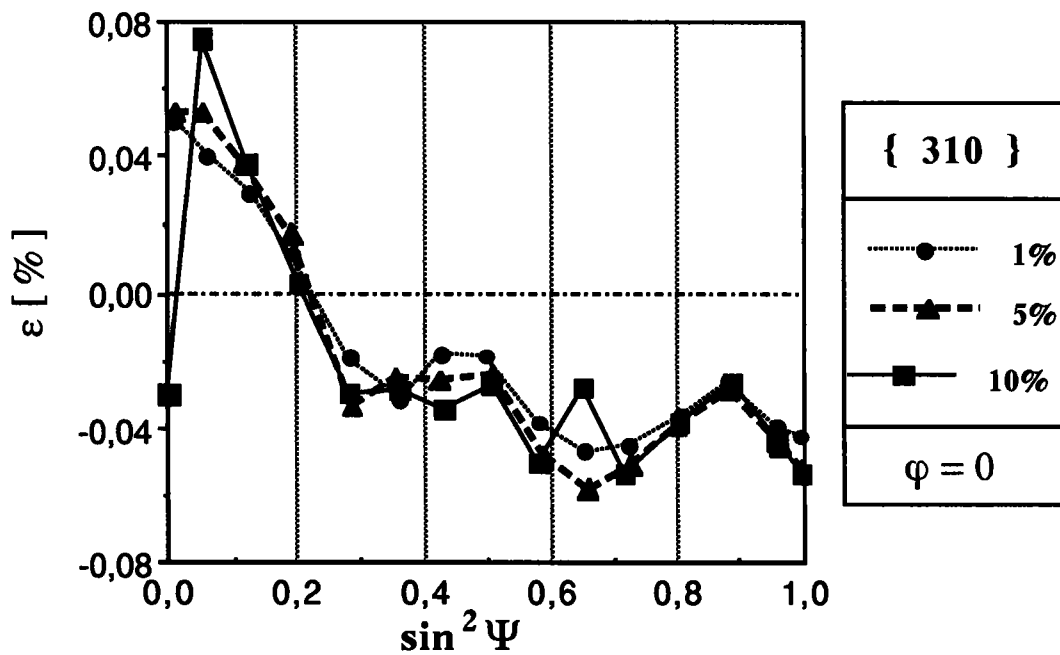
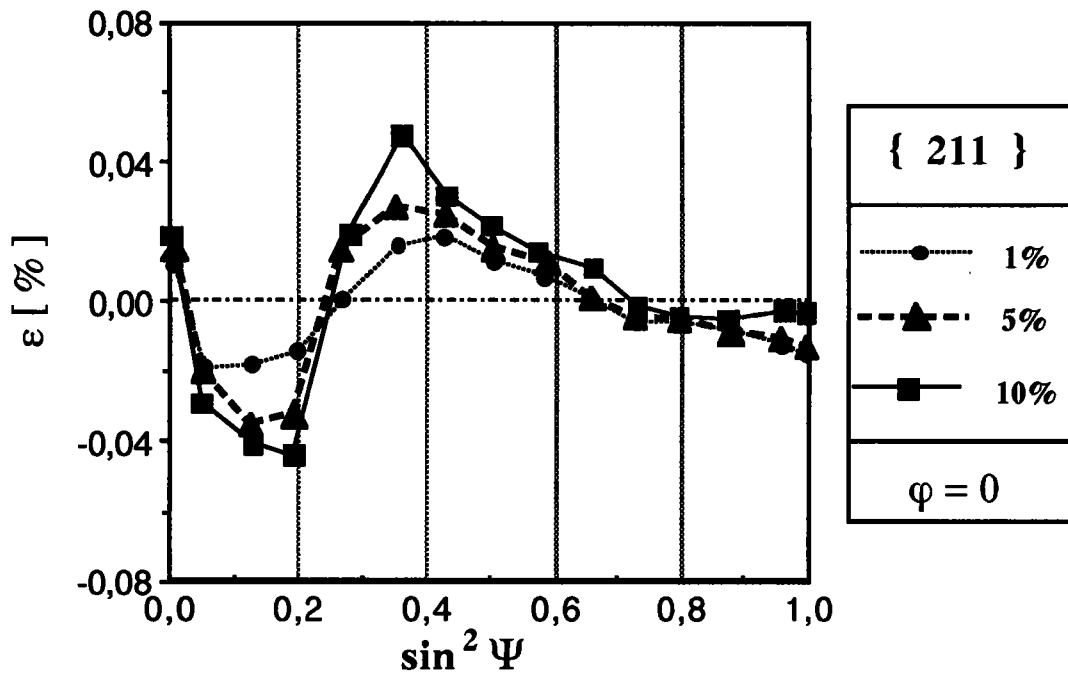


Figure IV-9 : Evolution calculée des courbes $\varepsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2 \Psi)$ dans la direction de traction en fonction de la déformation plastique en traction simple pour des matériaux possédant une texture de laminage.

matériau texturé

Nous effectuons maintenant les mêmes opérations pour le polycristal modèle représentant l'acier doux IFHR 400 pour observer l'influence de la texture de laminage. La figure IV-9 présente les courbes de déformations $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2 \Psi)$ pour les plans {211} et {310} dans la direction de traction. La texture cristallographique se manifeste pour les plans {211} par des oscillations des courbes de déformations.

Les courbes pour les plans {310} présentent une pente plus importante et possèdent également des oscillations. Les oscillations sont dues, dans le cas de la plasticité, à la texture cristallographique qui repositionne les grains autour d'orientations idéales qui développent individuellement des contraintes internes différentes dont la moyenne sur le volume diffractant diffère du cas précédent. Pour les plans {211}, les déformations moyennes mesurées sur le volume diffractant ne sont plus indépendantes de l'angle Ψ mais oscillent autour d'une déformation nulle.

La figure IV-10 montre l'évolution des courbes de déformations normales aux famille de plans {211} et {310} calculées et mesurées dans la direction de traction pour une déformation plastique équivalente de 5%. Elle permet de comparer l'allure et l'amplitude des oscillations et des pentes calculées et mesurées. Dans le cas des plans {211}, les oscillations mesurées et calculées ont la même allure mais des amplitudes différentes. On observe une amplitude de 3.10^{-4} pour les courbes mesurées et de 6.10^{-4} pour les courbes calculées. Pour les plans {310}, les pentes mesurées et calculées ont également sensiblement la même la forme. Les courbes calculées présentent cependant des oscillations supplémentaires dues à la texture qui se superposent à la pente. Les amplitudes pour les courbes mesurées sont de 5.10^{-4} et de 11.10^{-4} pour les courbes calculées. Les déformations normales $\varepsilon_{\varphi\psi}$ calculées sont donc deux fois plus élevées que les déformations mesurées par diffraction des rayons X. Cette différence peut s'expliquer par le fait que les mesures par diffraction des rayons X s'effectuent en surface de l'échantillon où, pour des raisons d'équilibre, le champ de contrainte doit être bidimensionnel alors que le calcul s'effectue avec l'hypothèse que le milieu est infini, c'est à dire tridimensionnel. De plus, à la surface de l'éprouvette la présence de la surface libre donne lieu à des phénomènes de relaxation qui diminuent les contraintes résiduelles et provoquent des interactions différentes entre les grains. Il serait judicieux dans ce cas de développer

ce modèle en utilisant un tenseur de Green semi-infini ou de comparer les calculs à des mesures effectuées par diffraction de rayonnements neutrons qui permettent d'étudier les contraintes en profondeur. D'autre part, l'écroutissage du polycristal modèle est linéaire et ne s'adapte pas parfaitement à l'écroutissage réel. Pour obtenir un écroutissage plus proche de la réalité et un champ de contraintes résiduelles plus faible, il faudrait tenir compte de l'annihilation de dislocations avec l'augmentation du taux de déformation plastique.

La figure IV-11 montre l'évolution des déformations normales à quatre familles de plans de diffraction. Il apparaît sur cette figure que les plans de glissement, $\{211\}$ et $\{110\}$ ne subissent que de faibles déformations suivant leur normale. Pour les autres plans, $\{111\}$, $\{310\}$ et $\{210\}$, une droite moyenne présente une pente, positive ou négative qui dépend de leur nature. La détermination des contraintes à partir de ces pentes pour $\sin^2\Psi$ inférieur à 0.6 à l'aide de la loi des $\sin^2\Psi$ donnerait les contraintes résiduelles qui figurent dans le tableau IV-3 pour les matériaux modèles et pour l'échantillon IFHR 400. On observe pour les plans de glissement $\{211\}$ et $\{110\}$ que les contraintes résiduelles sont en moyenne très faibles pour le matériau sans texture et induisent des oscillations des courbes $\varepsilon_{\varphi\psi}$ pour le matériau avec texture, mais les pentes des courbes sont nulles.

Les pentes présentes pour les autres plans conduisent à des contraintes négatives pour les plans $\{310\}$ et $\{210\}$, mais à des contraintes positives pour les plans $\{111\}$. En moyenne sur tous les plans, elles devraient être nulles.

La figure IV-12 présente les courbes de déformations $\varepsilon_{\varphi\psi}$ dans la direction transverse. On observe des courbes de pentes nulles et des déformations nulles pour $\{211\}$, positives pour $\{111\}$ ou négatives pour $\{310\}$. Ces courbes indiquent que les contraintes dans la direction transverse sont nulles et signalent la présence de contraintes normales σ_{33} non nulles. En moyenne sur le polycristal ces contraintes devraient être nulles. Les contraintes déterminées de cette manière n'ont rien de contraintes macroscopiques et la loi des $\sin^2\Psi$ n'est plus adaptée après déformations plastiques.

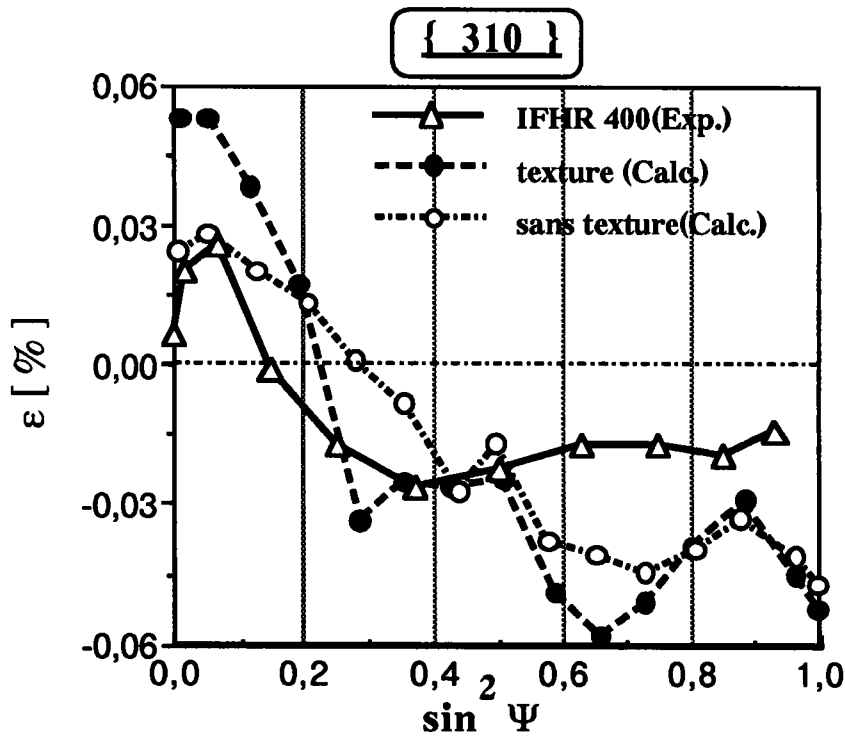
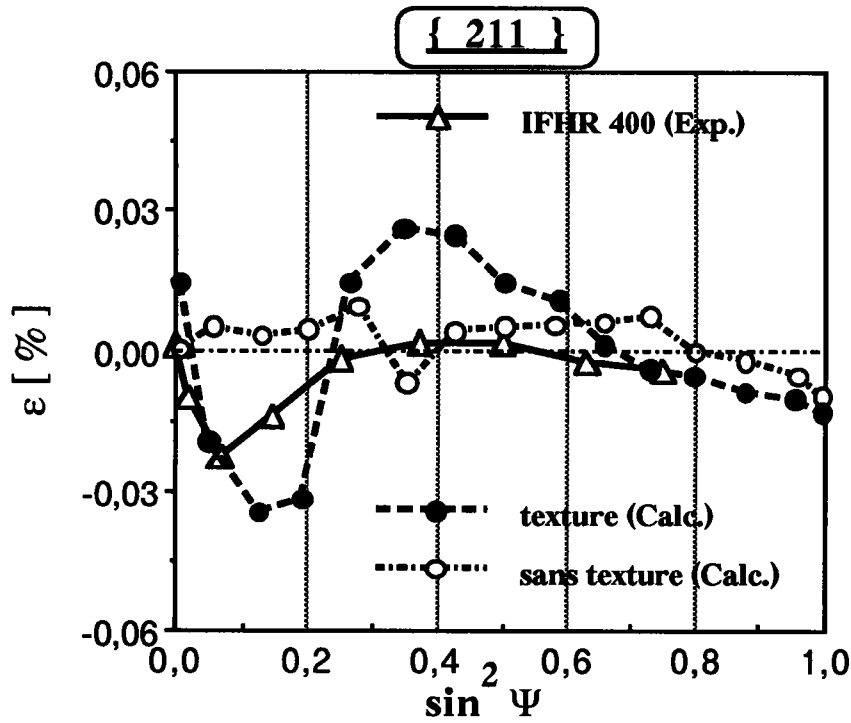


Figure IV-10 : Comparaison des courbes $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2 \Psi)$ mesurées et calculées dans la direction de traction pour des plans {211} et {310}.

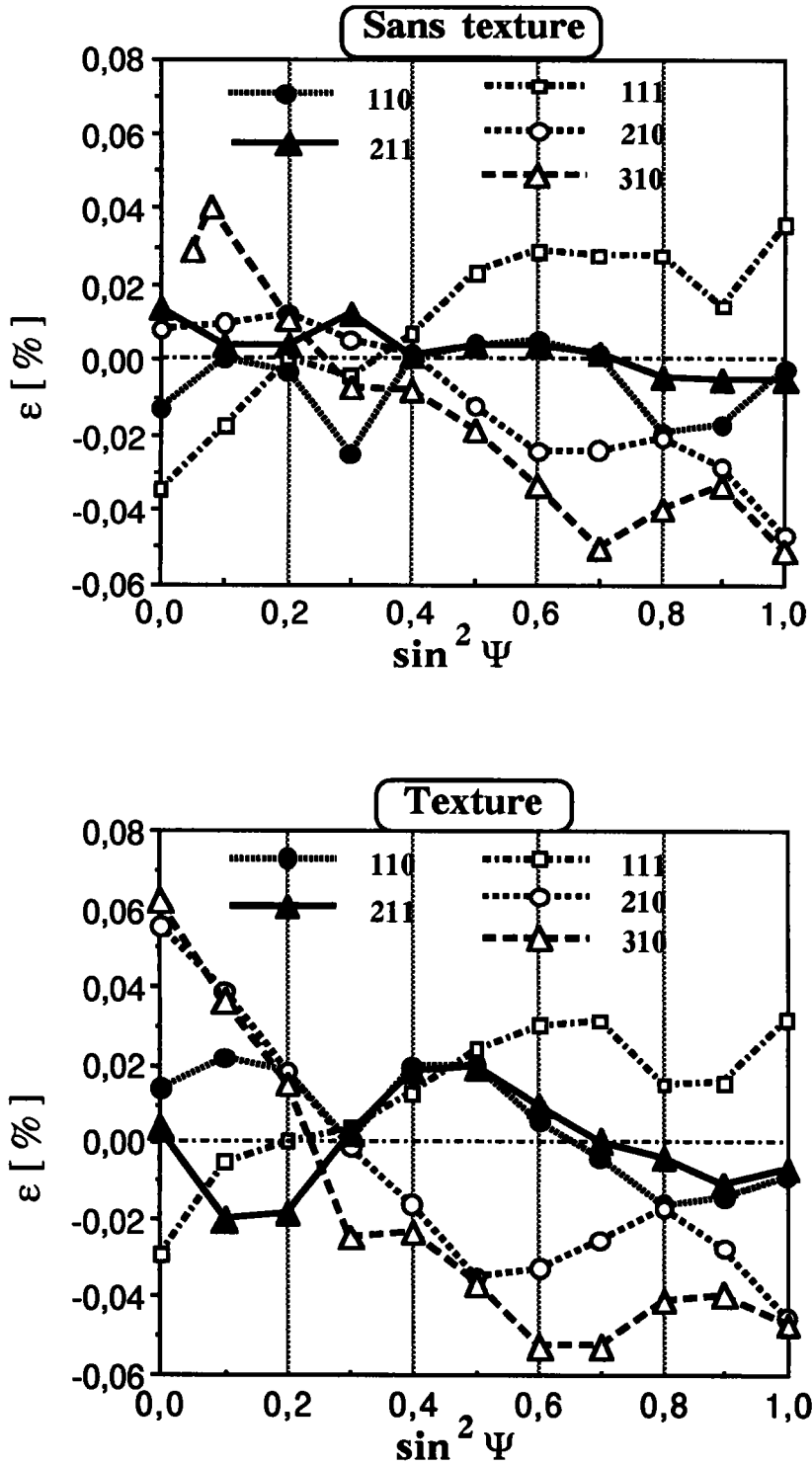


Figure IV-11 : Evolution calculée des courbes $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2 \Psi)$ dans la direction de traction en fonction des plans de diffraction après déformation en traction de 5%. $\varphi = 0^\circ$.

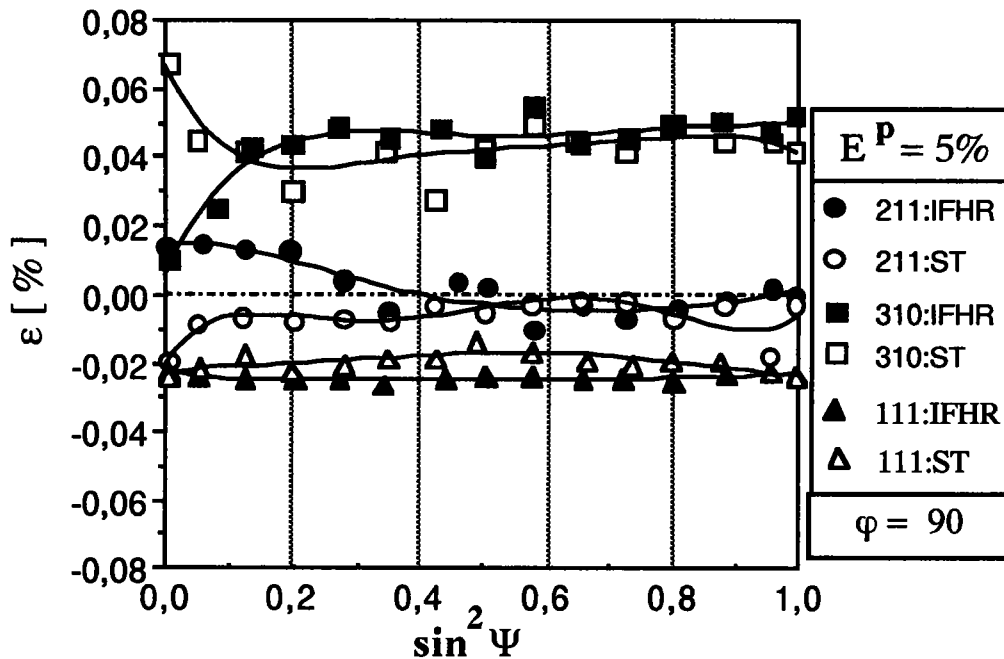


Figure IV-12 : Evolution calculée des courbes $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2 \Psi)$ dans la direction transverse après traction simple dans la direction de laminage jusqu'à 5%. (ST pour sans texture).

σ_{11} (MPa)	{110}	{211}	{310}	{210}	{111}
IFHR 400	-	≈ 0	-153	-	-
Sans texture	≈ 0	≈ 0	-166	-88	202
Texture	≈ 0	≈ 0	-257	-279	188

Tableau IV-4 : Estimation des contraintes résiduelles pour les matériaux modèles et l'acier IFHR 400.

IV.1.6. Conclusions.

Nous avons étudié dans ce paragraphe les contraintes résiduelles dans les matériaux polycristallins monophasés de type cubique centré après une déformation plastique en traction simple.

Les mesures effectuées par diffraction des rayons X indiquent que les déformations résiduelles

calculées par le modèle autocohérent sont deux fois plus importantes que celles mesurées. Notons cependant que les mesures s'effectuent en surface des échantillons sur une faible épaisseur dans laquelle l'état de contrainte peut être supposé biaxial pour respecter les conditions d'équilibre. De ce fait, les interactions réelles entre grains sont différentes du calcul pour lequel le milieu est supposé infini, c'est-à-dire triaxial. De plus, la surface libre permet la fuite des dislocations et de ce fait favorise des phénomènes de relaxation. Pour adapter le calcul autocohérent aux mesures en surface par diffraction des rayons X, il faudrait transformer le tenseur de Green pour un milieu semi-infini, ou effectuer des comparaisons entre calcul autocohérent et mesures effectuées par diffraction de neutrons qui permettent des observations en profondeur. Si les mesures sous-estiment les contraintes résiduelles, le calcul autocohérent les surestime dans la mesure où l'écroutissage monocristallin est supposé linéaire et ne permet pas de reproduire parfaitement l'écroutissage effectif du polycristal. En effet, il néglige les phénomènes d'annihilation de dislocations qui augmentent avec le taux de déformation plastique.

Les mesures par diffraction des rayons X permettent cependant de retrouver les effets caractéristiques des hétérogénéités de la déformation plastique qui se manifeste par des oscillations dans la loi des $\sin^2\Psi$ et par des contraintes qui se manifestent comme des contraintes d'ordre I.

Cette loi conduirait à des contraintes macroscopiques nulles pour les plans les plans de glissement $\{211\}$ et $\{110\}$, mais non nulles pour les autres plans de diffraction. Il semble donc qu'elle ne soit plus adaptée en présence de contraintes (déformations) résiduelles.

IV.2. Polycristaux biphasés.

IV.2.1. Biphase hypoeutectoïde

Nous avons étudié, dans le paragraphe précédent l'évolution des déformations et contraintes résiduelles dans des matériaux monophasés où l'influence des hétérogénéités provient uniquement de l'orientation des constituants par rapport à la direction de sollicitation. Nous introduisons dans ce paragraphe les hétérogénéités élastoplastiques entre deux phases en étudiant un acier hypoeutectoïde du type XC45 qui se compose d'une phase élastoplastique, la ferrite, et d'une phase purement élastique, la cémentite.

Le but de cette partie est de calculer les contraintes résiduelles dans la cémentite très difficile à mesurer par diffraction des rayons X. Pour déterminer ces contraintes, nous combinons le calcul élastoplastique et l'application de la solution du problème de l'inclusion dans une matrice d'Eshelby-Kröner [4,5]. Ce paragraphe permet également de déterminer l'influence des hétérogénéités entre phases sur la loi des $\sin^2\Psi$ et de la comparer avec l'influence des hétérogénéités de la déformation plastique dans un matériau monophasé.

Les deux phases de l'acier XC45 sont réparties dans deux constituants, la ferrite pure qui représente 60% du volume total et la perlite qui représente 40%. Nous supposons que la perlite se compose de ferrite et de cémentite globulaire (12% du volume), figure IV-13. Le comportement élastique des deux phases est supposé identique et caractérisé par un module de cisaillement $\mu = 80$ GPa et un rapport de poisson $\nu = 0,28$.

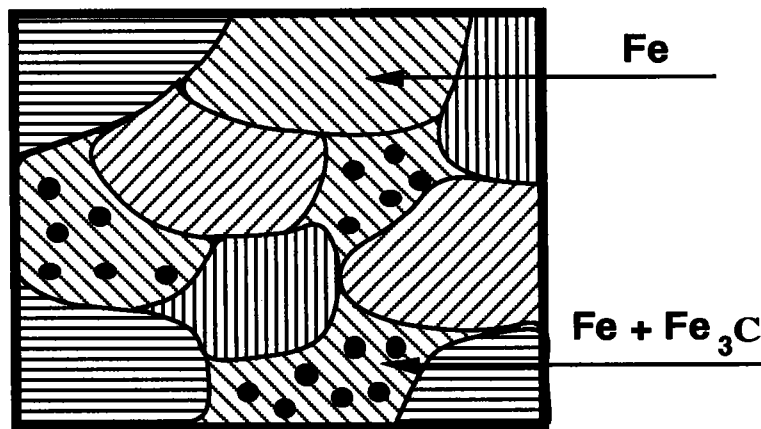


Figure IV-13 : Schématisation des composants de l'acier XC45.

IV.2.1.1. calcul des contraintes internes

Le calcul des contraintes résiduelles dans les différentes phases s'effectue en deux étapes. Nous calculons dans un premier temps, les comportements locaux dans les deux constituants, ferrite et perlite après une déformation plastique équivalente de 5% en traction simple par le modèle autocohérent. Pour tenir compte de la présence de globules de cémentite dans la perlite, nous avons introduit une forme particulière de la matrice d'écrouissage. Cette matrice, classique pour le calcul

dans la ferrite, se complète d'un terme qui prend en compte la présence de cémentite globulaire dans la perlite [42].

Le polycristal modèle se compose de 3000 cristallites de forme sphérique et orientés de façon aléatoire. La deuxième étape consiste à calculer les contraintes dans les deux phases de la perlite, connaissant les contraintes et les déformations plastiques locales de chaque grain, à l'aide de la solution de Kröner :

$$\sigma_{ij}^{cem} = \sigma_{ij}^{per} + 2 \mu (1 - \beta) \left(\varepsilon_{ij}^{per} - \varepsilon_{ij}^{p^{cem}} \right) \quad (IV-2)$$

avec

$$\varepsilon_{ij}^{p^{cem}} = 0 \quad (\text{pas de déformation plastique dans la cémentite})$$

$$\sigma_{ij}^{fer} = \frac{1}{1 - f} \left(\sigma_{ij}^{per} - f \sigma_{ij}^{cem} \right) \quad (IV-3)$$

où f est la fraction volumique de cémentite dans la perlite.

Ce calcul permet de déterminer les contraintes résiduelles dans la ferrite des deux phases et dans la cémentite, comme elles seraient mesurées par diffraction des rayons X.

IV.2.1.2. calcul autocohérent

La figure IV-14 met en évidence les microcontraintes moyennes spécifiques à chaque constituant, ferrite et perlite. Les cristallites de la ferrite pure sont en moyenne comprimés, et ceux de la perlite sont tendus suivant la direction de sollicitation, après décharge. On observe une forte variation jusqu'à 1% de déformation plastique, les contraintes augmentent ensuite beaucoup moins rapidement. Ces microcontraintes sont nulles en moyenne sur les deux constituants.

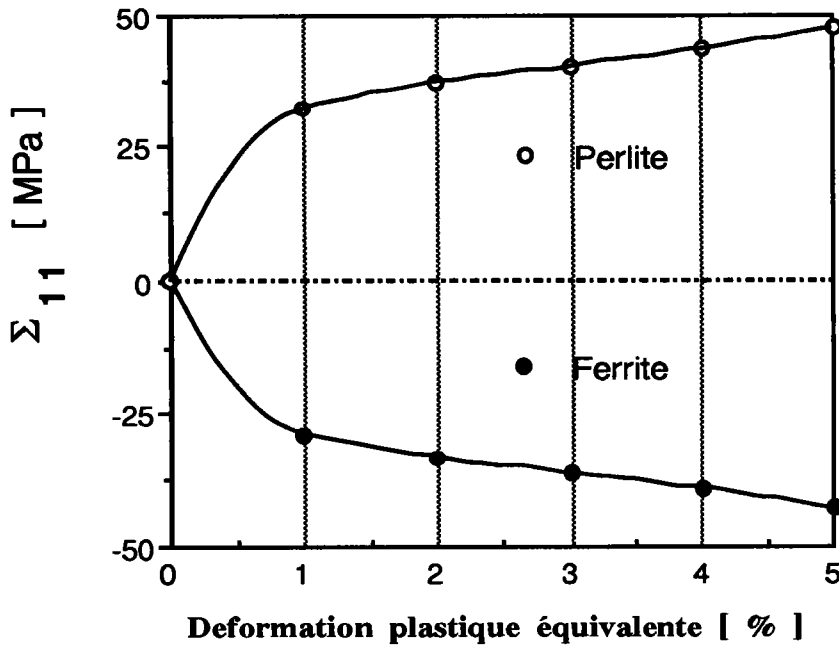


Figure IV-14: Evolution des contraintes internes moyennes calculée dans la ferrite et la perlite d'un acier XC45.

IV.2.1.3. contraintes dans la cémentite

Les résultats obtenus en fonction du taux de déformation plastique en traction simple sont présentés sur la figure IV-15. Les calculs montrent que la moyenne des contraintes résiduelles sur les deux constituants est nulle en moyenne sur tout le volume. On observe des contraintes résiduelles de compression dans la direction de sollicitation pour la phase ferrite et de traction pour la phase cémentite.

Pour un acier similaire, Macherauch et Kolb [43] ont effectué des mesures de contraintes internes, pendant un essai de traction, dans la ferrite. Ils ont effectué les même mesures dans la ferrite du matériau déchargé, figure IV-16.

Connaissant les contraintes macroscopiques dans la ferrite et pour le polycristal, il est possible de déterminer l'état de contraintes macroscopique dans la cémentite, en fonction de la fraction volumique respective des deux phases. De la même manière, sachant que les contraintes résiduelles sont nulles en moyenne sur tout le volume, la contrainte résiduelle dans la ferrite permet de donner une valeur de la contrainte résiduelle dans la cémentite dans la direction de traction. Ces contraintes de traction sont données dans le tableau IV-4 pour une déformation plastique équivalente de 5%.

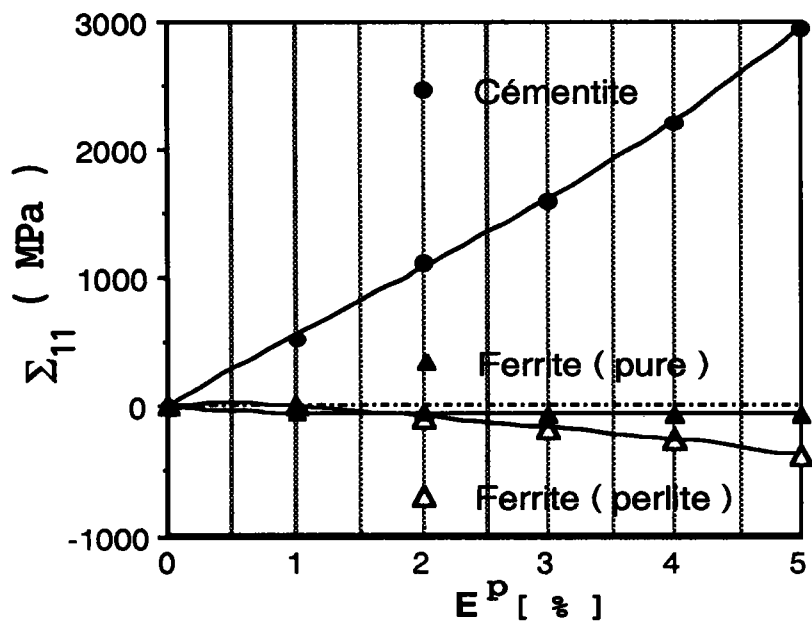


Figure IV-15 : Evolution des contraintes moyennes calculée dans les constituants d'un XC45 en fonction de la déformation plastique en traction simple.

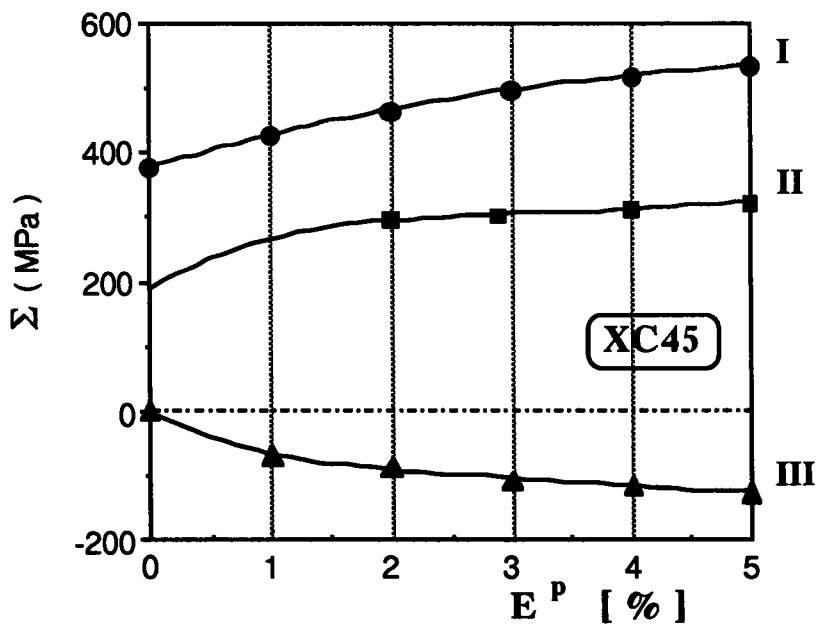


Figure IV-16 : Courbe de traction d'un acier à 0.45% de carbone (I), contraintes mesurées pendant l'essai dans la ferrite (II) et contraintes résiduelles dans la ferrite (III).

	Sous charge			Résiduelle	
	Globale	Ferrite	cémentite	Ferrite	cémentite
Expérience	525	315	4690	-130	2578
Calcul	433	251	4127	-104	2580

(MPa)

Tableau IV-5: Comparaison entre mesures et calls des contraintes dans un XC45, pour un essai de traction simple ($E^P = 5\%$).

Le tableau IV-5 montre que les contraintes globales simulées sont inférieures à celles mesurées par Kolb et Macherauch. L'erreur sur les contraintes moyennes dans la cémentite est de l'ordre de 20%. Ces calculs permettent néanmoins de donner une bonne approximation des contraintes résiduelles dans la cémentite.

IV.2.1.4. Loi des $\sin^2 \Psi$

Comme dans le cas de l'acier monphasé, nous avons simulé les courbes $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2 \Psi)$ pour les plans {211} et {310} sur l'ensemble de la ferrite, figure IV-17.

Etudions tout d'abord les résultats dans la direction de traction, $\varphi=0^\circ$. En comparant les figures IV-8 relatives au polycristal monphasé sans texture et la figure IV-17, on observe que la courbe pour les plans {211} présente une pente négative qui indique la présence de contraintes de compression dans la phase ferrite. Pour des plans {310}, la pente est 2 fois plus importante et met en évidence la superposition des hétérogénéités plastiques intraphases et celles dues à la présence de la phase dure (cémentite).

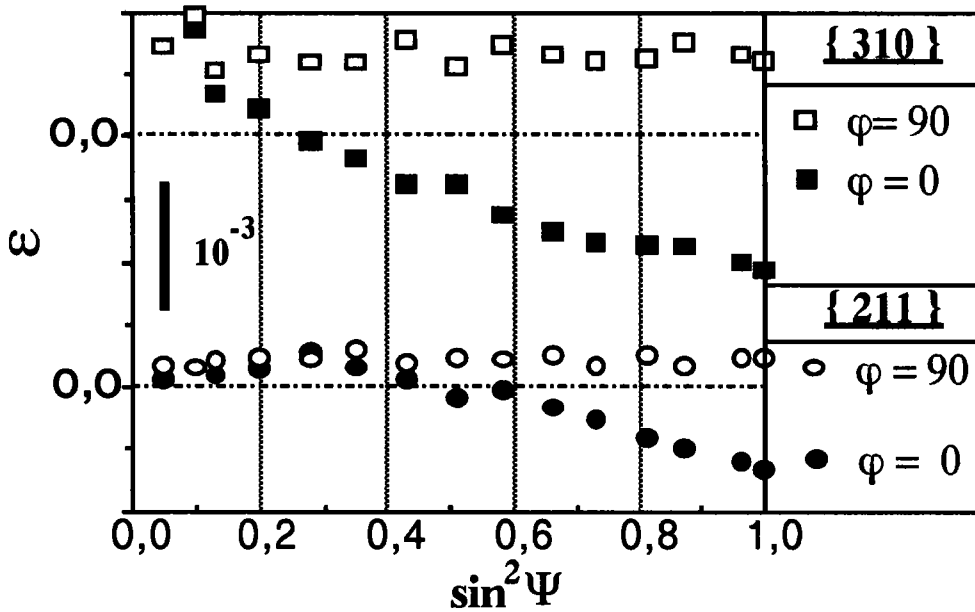


Figure IV-17 : Evolution calculée des courbes $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2\Psi)$ dans la ferrite après traction simple de 5% puis décharge.

La tableau IV-6 donne les valeurs des contraintes calculées pour l'acier monophasé et pour l'acier biphasé. Dans la direction transverse, $\varphi=90^\circ$, les courbes de déformations sont sensiblement linéaires et montrent que la contrainte macroscopique dans cette direction est nulle. Elles permettent également de déterminer des contraintes normales σ_{33} non nulles, tableau IV-6.

[MPa]	σ_{11}		σ_{33}	
	{211}	{310}	{211}	{310}
Monophasé	0	-120	0	220
Biphasé	-150	-255	160	360

Tableau IV-6 : Contraintes calculées dans la ferrite de l'acier XC 45 à partir des courbes $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2\Psi)$ dans la ferrite.

IV.2.1.5. conclusions

Nous avons vu que le modèle autocohérent permettait de calculer les contraintes résiduelles dans les polycristaux monophasés déformés plastiquement. Ce paragraphe permet de montrer qu'il était également possible de déterminer les contraintes résiduelles dans la cémentite d'un acier biphasé en supposant que cette phase est indéformable et se présente sous la forme de globule. La combinaison du modèle autocohérent et du modèle de Kröner conduit à la détermination de contraintes résiduelles dans la cémentite proches des contraintes calculées à partir de mesures expérimentales globales et dans la phase élastoplastique (ferrite). Les mesures directes dans la cémentite sont extrêmement délicates à effectuer dans les aciers.

Le calcul montre également que les hétérogénéités de la déformation plastique observées dans les matériaux monophasés se superposent aux hétérogénéités entre phases. Les contraintes résiduelles, nulles en moyenne sur tout le volume, sont spécifiques à chaque phase ; c'est ainsi qu'on observe des contraintes de compression de la ferrite et des contraintes de traction dans la cémentite.

La superposition des hétérogénéités plastiques intra- et interphases rend la détermination des contraintes à partir de la loi des $\sin^2\Psi$ aussi délicate que dans le cas du monophasé. Une mesure à partir des plans de la famille $\{211\}$ qui est insensible aux hétérogénéités plastiques dans le cas du matériau monophasé devrait permettre de déterminer des contraintes spécifiques à une phase proches de la réalité.

IV.2.2. Traitements de surface

Les usinages et les traitements de surface tels que rectification, tournage ou grenailage induisent des déformations plastiques en surface qui affectent les états de contraintes et de déformations des couches superficielles de l'échantillon.

Pendant les opérations de rectification, par exemple, la surface extérieure est soumise à des efforts normaux \vec{N} et tangentiels \vec{T} entre l'outil et l'échantillon illustrés par la figure IV-18.

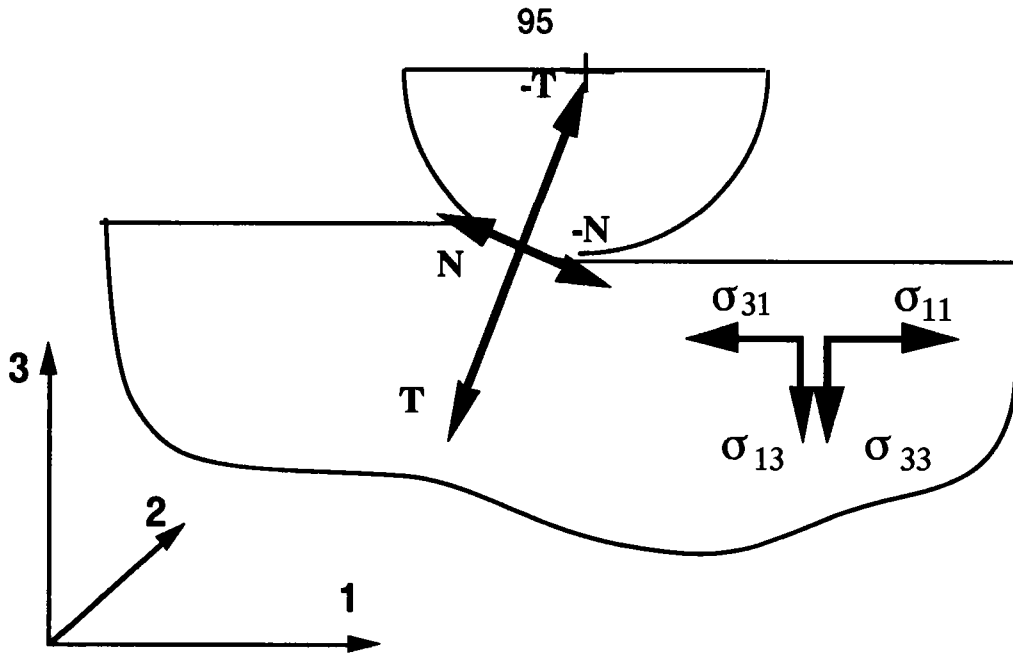


Figure IV-18 : Mise en évidence des contraintes en surface pendant rectification.

Ces efforts peuvent être transformés en contraintes normales et tangentiels dans le repère de l'échantillon. Après traitement, les composantes σ_{33}, σ_{13} (σ_{23}) doivent être nulles à la surface ($x_3 = 0$), elles ne peuvent exister que sous la forme de moyenne volumique sur la profondeur de pénétration des rayons X.

La méthode d'analyse des contraintes est basée sur la loi des $\sin^2\Psi$ (§ II.1.), dont nous rappelons l'équation fondamentale en fonction du tenseur des contraintes complet.

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\varphi\psi} = & \frac{1}{2} S_2 \left[\sigma_{11} \cos^2 \varphi + \sigma_{22} \sin^2 \varphi + \sigma_{12} \sin 2\varphi - \sigma_{33} \right] \sin^2 \Psi + S_1 \left[\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33} \right] \\ & + \frac{1}{2} S_2 \left[\sigma_{33} + \sigma_{13} \cos \varphi \sin 2\psi + \sigma_{23} \sin \varphi \sin 2\psi \right] \end{aligned} \quad (\text{IV-4})$$

où σ_{ij} correspond à la valeur moyenne des contraintes sur tout le volume diffractant de la phase mesurée.

$S_1, 1/2 S_2$ sont les constantes élastiques radiocristallographiques. N^h ($\sin\Psi \cos\varphi, \sin\Psi \sin\varphi,$

$\cos\Psi$).

$\varepsilon_{\varphi\Psi}$ est la déformation moyenne sur tous les grains pointant dans la direction de mesure N^h normale aux plans diffractants.

La représentation des déformations en fonction de $\sin^2\Psi$, linéaire lorsque l'état de contraintes est biaxial, présente des non linéarités dues à l'apparition des composantes σ_{i3} . Ces termes, qui sont multipliés par $\sin 2\Psi$ dans l'équation (IV-4) sont dépendant de l'angle Ψ de mesure, et

responsables du dédoublement de la loi des $\sin^2\Psi$ qui apparait pour des matériaux multiphasés. En effet, sur la surface extérieur ($x_3 = 0$), les relations d'équilibre du tenseur des contraintes doivent être vérifiées

$$\sigma_{3i} (x_1, x_2, x_3) = 0 \quad \text{et} \quad \sigma_{ij, j} = 0 \quad \left(\frac{\partial\sigma_{11}}{\partial x_1} + \frac{\partial\sigma_{12}}{\partial x_2} + \frac{\partial\sigma_{13}}{\partial x_3} = 0, \text{ par exemple} \right)$$

(IV-5)

De ce fait, des contraintes macroscopiques σ_{i3} différentes de zéro dans le volume irradié ne sont possibles que s'ils existent des gradients d'autres composantes du tenseur des contraintes macroscopiques suivant les directions 1 ou 2. Ceci est difficilement envisageable dans un matériau monophasé. Dans un matériau multiphasé, une déformation plastique pourrait induire dans chaque phase de tels gradients de signe différent selon la phase, de telle manière qu'en moyenne sur toutes celles-ci la valeur de σ_{i3} macroscopique soit nulle.

En principe le dédoublement peut être lié à de nombreux phénomènes, par exemple :

- texture spéciale de la surface externe
- rugosité de celle-ci
- et/ou un états de contraintes complexe induisant un décalage du repère principal du tenseur des contraintes (déformations) par rapport au repère macroscopique de l'échantillon.
- une morphologie particulière de la seconde phase.

En pratique notre étude se limite aux deux derniers cas cités.

Ce travail a pour but d'expliquer certains phénomènes expérimentaux par des modèles simples qui en donnent des réponses qualitatives. Pour obtenir des résultats quantitatifs, il serait nécessaire d'appliquer le calcul autocohérent élastoplastique à ce type de problèmes.

IV.2.2.1. Simulation du dédoublement

Plusieurs hypothèses sont introduites afin de simuler les contraintes internes dans un matériau biphasé, elles permettent d'obtenir des résultats simples mais représentatif de la réalité.

Le matériau, macrohomogène et microhétérogène, est constitué d'une matrice, ductile à comportement élastoplastique, contenant des inclusions non ductiles de fraction volumique f . Le comportement élastique isotrope homogène est identique dans les deux phases et caractérisé par le module de cisaillement μ et le rapport de poisson ν .

Les opérations d'usinage, rectification ou grenailage introduisent une déformation plastique globale E^P sur la surface externe. Cette déformation est concentrée dans la matrice et donne naissance aux contraintes internes du fait de la non plastification des inclusions. Elle se compose d'une partie élastique E^e et d'une partie plastique E^P .

Si ε^{pM} et ε^{pE} ($=0$) sont les valeurs moyennes des déformations dans la matrice et dans l'ellipsoïde, on a

$$E_{ij}^p = f \varepsilon_{ij}^{pE} + (1-f) \varepsilon_{ij}^{pM} = (1-f) \varepsilon_{ij}^{pM} \quad (IV-6)$$

La solution du problème de l'inclusion dans une matrice d'Eshelby-Kröner [4, 5] permet d'écrire

$$E_{ij}^t - \varepsilon_{ij}^{tE} = S_{ijkl} (E_{kl}^p - \varepsilon_{kl}^{pE}) \quad (IV-7)$$

L'échantillon n'est pas chargé extérieurement $E^e=0$, l'équation précédente devient

$$\varepsilon_{ij}^{eE} = (I_{ijkl} - S_{ijkl}) E_{kl}^p \quad (IV-9)$$

où I_{ijkl} est le tenseur unité d'ordre 4 et S_{ijkl} est le tenseur d'Eshelby

La déformation moyenne dans les inclusions dans la direction de mesure N^h se met sous la forme

$$\bar{\varepsilon}_{\varphi\psi}^E = N_i N_j (I_{ijk1} - S_{ijk1}) E_{k1}^P \quad (IV-10)$$

La valeur correspondante dans la matrice est obtenue par les conditions d'équilibre pour $E^e=0$

$$\bar{\varepsilon}_{\varphi\psi}^M = -\frac{f}{1-f} \bar{\varepsilon}_{\varphi\psi}^E \quad (IV-11)$$

L'équation (IV-7) indique deux sources de dédoublement possibles, respectivement

- un tenseur des déformations globales décalé par rapport au repère de l'échantillon (présence de déformations macroscopiques de cisaillement).
- un tenseur d'Eshelby S anisotrope (grains non sphériques).

Ces deux causes sont maintenant traitées de manière légèrement différente.

IV.2.2.2. composantes de déformations E_{ij}^P - inclusions sphériques.

Dans les calculs qui suivent, nous considérons que les inclusions sont sphériques. Des opérations inclinées par rapport à la normale à l'éprouvette introduisent des déformations globales dont le tenseur possède la forme suivante

$$E_{ij}^P \begin{bmatrix} E_{11}^P & 0 & E_{13}^P \\ 0 & E_{22}^P & 0 \\ E_{13}^P & 0 & E_{33}^P \end{bmatrix} \quad (IV-11)$$

A partir de l'équation (IV-8), les contraintes moyennes dans les particules sphériques sont données par la formule d'Eshelby-Kröner

$$\sigma_{ij}^E = \Sigma_{ij} + 2\mu(1-\beta) \left[E_{ij}^P - \varepsilon_{ij}^P \right] \quad \text{avec} \quad \beta = \frac{2}{15} \frac{4-5\nu}{1-\nu} \quad (IV-12)$$

où Σ_{ij} sont les contraintes appliquées et β un facteur proche de 0,5.

Appliquée au présent problème l'équation (IV-12) devient

$$\sigma_{ij}^E = \Sigma_{ij} + \mu (1-f) \varepsilon_{ij}^{pM} \quad (IV-13)$$

De la relation de moyenne sur les contraintes

$$\Sigma_{ij} = f \sigma_{ij}^E + (1-f) \sigma_{ij}^M \quad (IV-14)$$

on déduit les contraintes moyennes σ_{ij}^M dans la matrice sous la forme

$$\sigma_{ij}^M = \Sigma_{ij} - \mu f \varepsilon_{ij}^{pM} \quad (IV-15)$$

En fonction des contraintes macroscopiques appliquées Σ et de la déformation globale E^P , les contraintes moyennes dans la matrice et dans les particules s'écrivent

$$\sigma_{ij}^M = \Sigma_{ij} - \mu \frac{f}{(1-f)} E_{ij}^P \quad \text{et} \quad \sigma_{ij}^E = \Sigma_{ij} + \mu E_{ij}^P \quad (IV-16)$$

Ces valeurs sont, en toute rigueur, valables uniquement pour un milieu infini, nous les supposons applicables dans le volume superficiel concerné par la mesure radiocristallographique.

A partir de (IV-4, IV-16), on obtient dans le cas où $\Sigma=0$, les relations

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\varphi\psi}^M &= -\frac{1}{2} \left\{ \left[E_{\varphi}^P - E_{33}^P \right] \sin^2 \psi + E_{33}^P + E_{13}^P \sin 2\psi \cos \varphi \right\} \\ \varepsilon_{\varphi\psi}^E &= \frac{1}{2} \left\{ \left[E_{\varphi}^P - E_{33}^P \right] \sin^2 \psi + E_{33}^P + E_{13}^P \sin 2\psi \cos \varphi \right\} \\ \text{où } E_{\varphi}^P &= E_{11}^P \cos^2 \varphi + E_{22}^P \sin^2 \varphi \end{aligned} \quad (IV-17)$$

L'observation de ces équations indique que le terme E_{13}^P est responsable du dédoublement.

Pour deux valeurs opposées de ψ , les déformations $\varepsilon_{\varphi\psi_+}$ et $\varepsilon_{\varphi\psi_-}$ sont différentes sauf

pour $\cos\varphi = 0$, soit $\varphi=90^\circ$, qui correspond à la direction de travail dans le plan de l'échantillon. Les résultats expérimentaux de Noyan et al. [44] pour un échantillon d'acier grenailé suivant un angle de 30° , ainsi que des mesures personnelles effectuées sur un acier XC45 rectifié trouvent ici leur explication, figure IV-19.

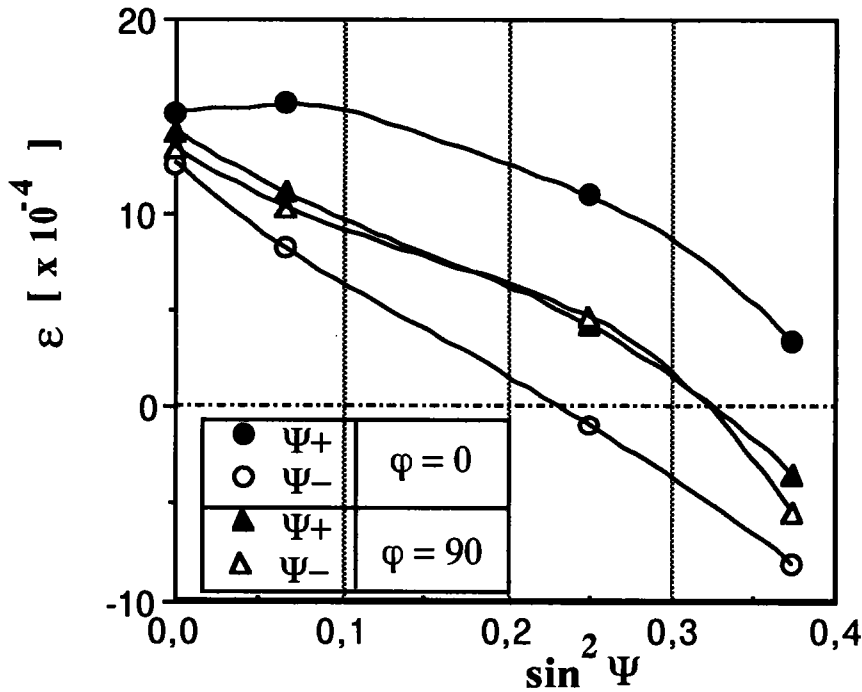


Figure IV-19 : Evolution mesurée des courbes de déformation dans la direction de grenailage ($\varphi=0^\circ$) et dans la direction transverse ($\varphi=90^\circ$).

Le dédoublement dans les deux phases s'exprime de la manière suivante

$$\Delta\varepsilon^M = -\frac{1}{2} \frac{f}{1-f} E_{13}^p \sin 2 \psi \cos \varphi$$

$$\Delta\varepsilon^E = \frac{1}{2} E_{13}^p \sin 2 \psi \cos \varphi$$

(IV-18)

On vérifie également que le dédoublement varie avec la fraction volumique de la deuxième phase (figure IV-20), Wakabayashi et al. [45] (figure IV-20). De plus les équations (IV-18) montrent que le dédoublement dans les deux phases est de signe opposé et conforme aux résultats de Hanabusa et Fujiwara [46], figure IV-21.

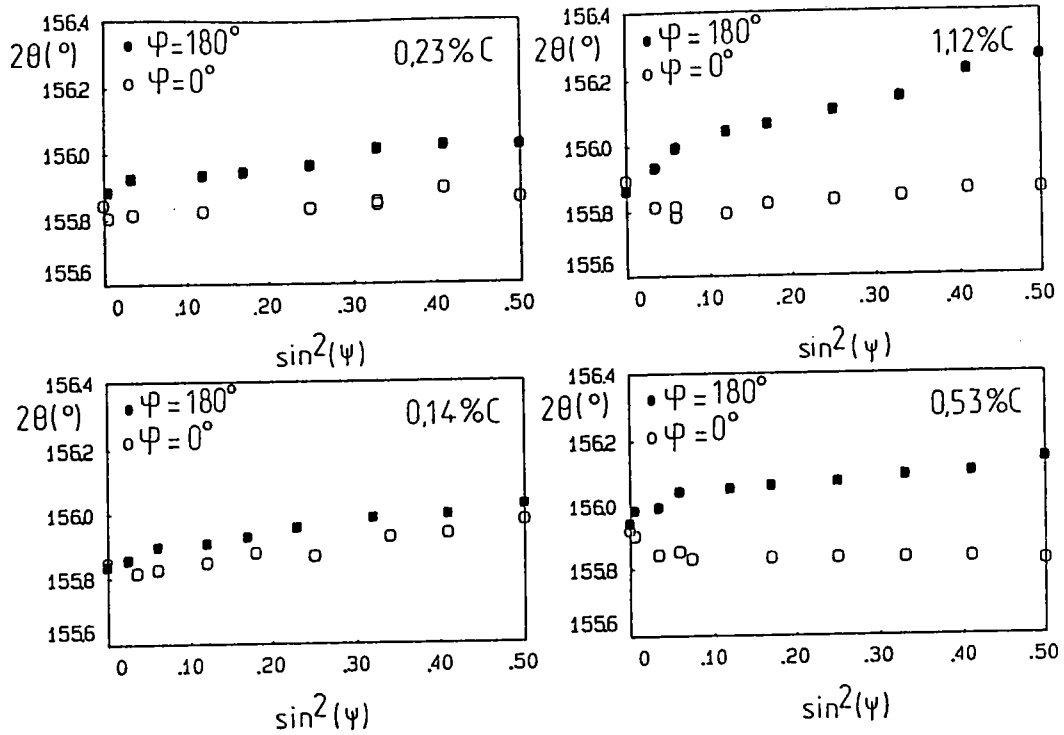


Figure IV-20 : Influence de la teneur en carbone des aciers sur le dédoublement des courbes $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2 \Psi)$.

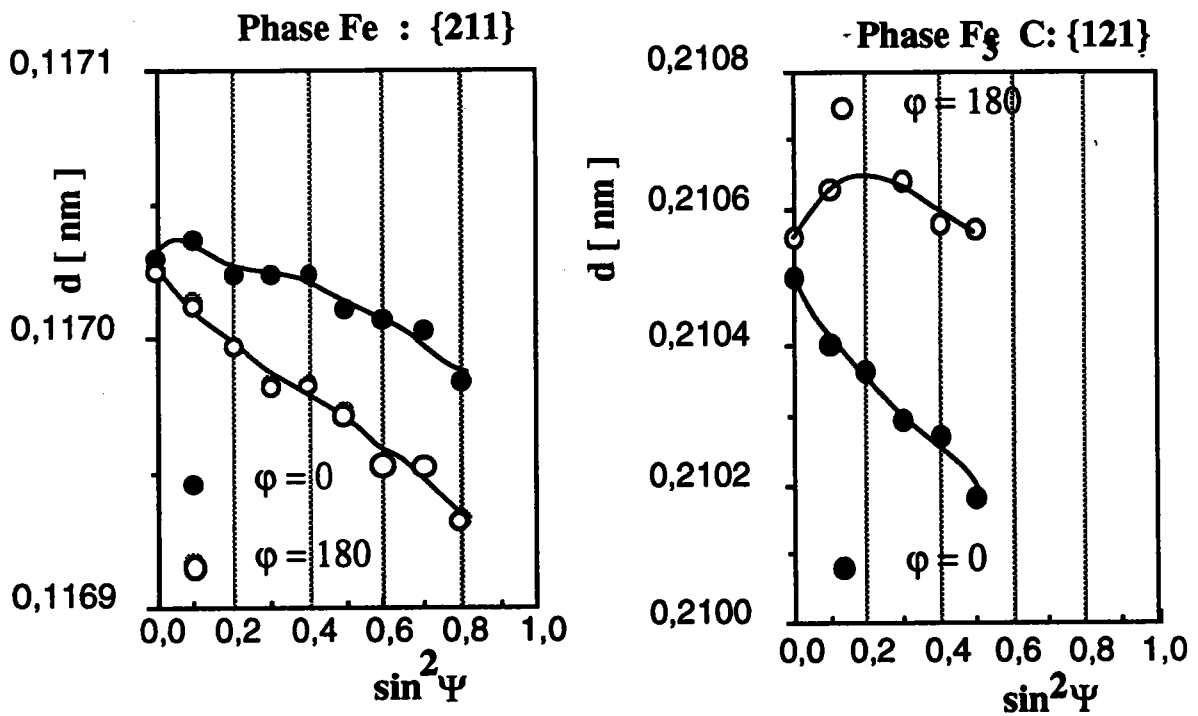


Figure IV-21 : Signe du dédoublement dans les deux phases, ferrite et cémentite d'un acier.

Pour une opération de grenailage, on peut raisonnablement simplifier la forme de E_{ij}^P en admettant que $E_{11}^P = E_{22}^P$. Du fait de l'incompressibilité plastique (Trace $E^P = 0$), E_{ij}^P s'écrit

$$E_{ij}^P \begin{bmatrix} \frac{1}{2}E_{33}^P & 0 & E_{13}^P \\ 0 & \frac{1}{2}E_{33}^P & 0 \\ E_{13}^P & 0 & -E_{33}^P \end{bmatrix} \quad (IV-19)$$

L'expression de $\varepsilon_{\varphi\psi}^M$ devient

$$\varepsilon_{\varphi\psi}^M = -\frac{1}{2} E_{33}^P \frac{f}{1-f} \left\{ 1 - \frac{3}{2} \sin^2 \psi - \frac{E_{13}^P}{E_{33}^P} \sin 2\psi \cos \varphi \right\} \quad (IV-20)$$

La simulation de l'évolution de $\varepsilon_{\varphi\psi}^M = f (\sin^2 \Psi)$ est effectuée en fonction de la fraction volumique f pour $\varphi=0$ et un rapport $E_{13}^P/E_{33}^P = 0,3$. La figure IV-22 confirme la croissance du dédoublement avec la fraction volumique f . La figure IV-23 montre l'évolution de $\varepsilon_{\varphi\psi}^M = f (\sin^2 \Psi)$ pour $f=0,3$, $\varphi=0$ en fonction du rapport E_{13}^P/E_{33}^P . Cette figure confirme l'augmentation du dédoublement avec l'intensité relative du cisaillement plastique.

Comme on peut le constater, le modèle proposé, bien que simple, permet une description satisfaisante des phénomènes liés au dédoublement de la loi des $\sin^2 \Psi$ dans les matériaux biphasés:

- . le dédoublement croît avec la fraction volumique de la deuxième phase,
- . il est maximum dans la direction d'usinage et nul dans la direction perpendiculaire,
- . il croît avec l'intensité relative de la composante de cisaillement de la déformation plastique macroscopique,
- . il est de signe opposé dans les deux phases.

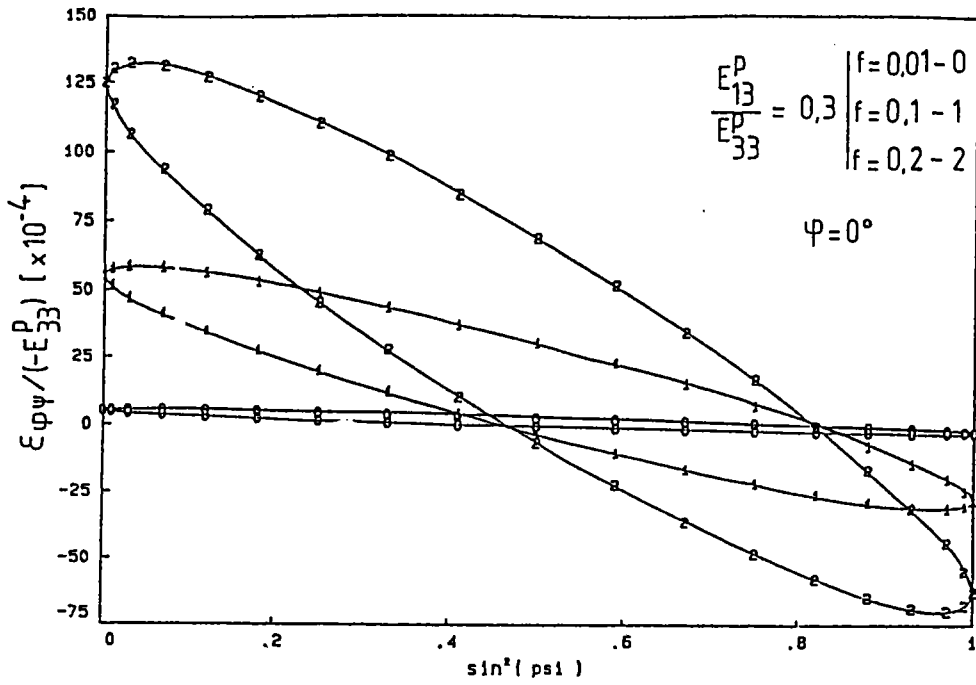


Figure IV-22 : Evolution des courbes de déformation en fonction de la fraction volumique : Calcul.

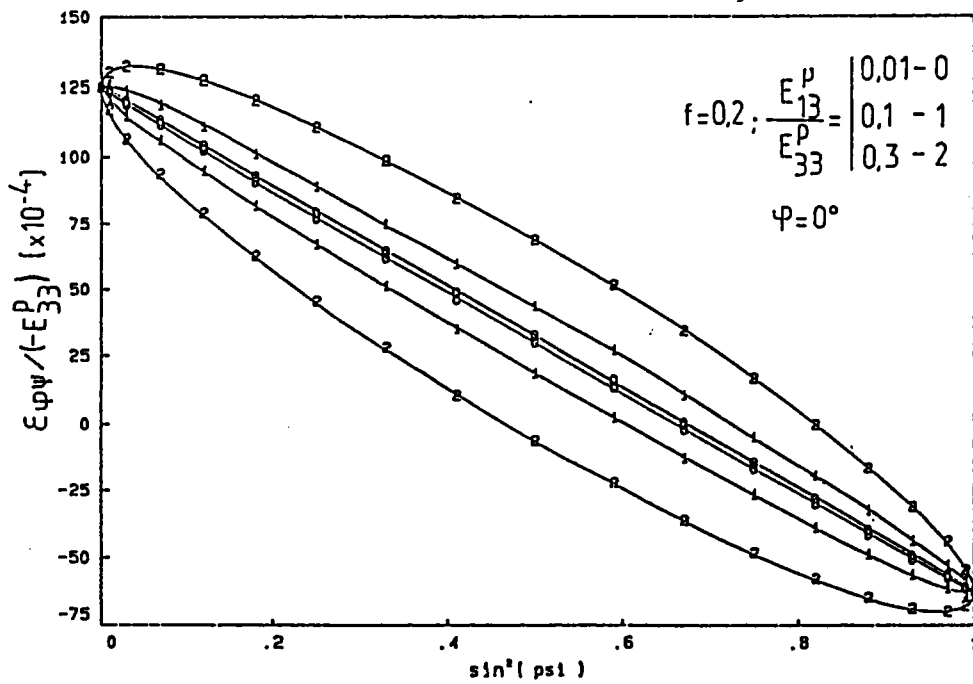


Figure IV-23 : Influence du taux de cisailment sur les courbes de déformation : Calcul.

IV.2.2.3. influence de la forme des constituants

Nous considérons maintenant un matériau biphasé au comportement parfaitement identique à celui du paragraphe précédent, mais dans lequel les inclusions ne sont plus sphériques, comportement isotrope de la microstructure, mais des disques d'axes $a=b$ et $c/a \ll 1$ (Penny-shape).

Le tenseur S dans un repère lié à a,b,c s'écrit [47]

$$\begin{aligned}
 S_{1111} = S_{2222} &= \frac{13 - 8\nu}{32(1-\nu)} \pi \frac{c}{a} & ; & \quad S_{3333} = 1 - \frac{1 - 2\nu}{1-\nu} \pi \frac{c}{a} \\
 S_{3311} = S_{3322} &= \frac{\nu}{1-\nu} \left(1 - \frac{4\nu - 1}{8\nu} \pi \frac{c}{a} \right) & ; & \quad S_{1122} = S_{2211} = \frac{8\nu - 1}{32(1-\nu)} \pi \frac{c}{a} \\
 S_{1133} = S_{2233} &= \frac{2\nu - 1}{8(1-\nu)} \pi \frac{c}{a} & ; & \quad S_{1313} = S_{2323} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\nu - 2}{1-\nu} \pi \frac{c}{a} \right) \\
 S_{1212} &= \frac{7 - 8\nu}{32(1-\nu)} \pi \frac{c}{a} & & \quad (IV-21)
 \end{aligned}$$

avec $S_{ijkl} = S_{ijlk} = S_{jikl} = S_{jilk}$; les autres composantes étant nulles.

Le repère des inclusions est analogue au repère de mesure, α correspond à ψ et γ à φ , figure IV-24.

Nous nous intéressons, dans un premier temps, à une opération de grenailage normal à la surface externe de l'échantillon, pour laquelle le tenseur des déformations plastiques globales se met sous la forme

$$E_{ij}^p \begin{bmatrix} \frac{1}{2} E_{33}^p & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} E_{33}^p & 0 \\ 0 & 0 & -E_{33}^p \end{bmatrix} \quad (IV-22)$$

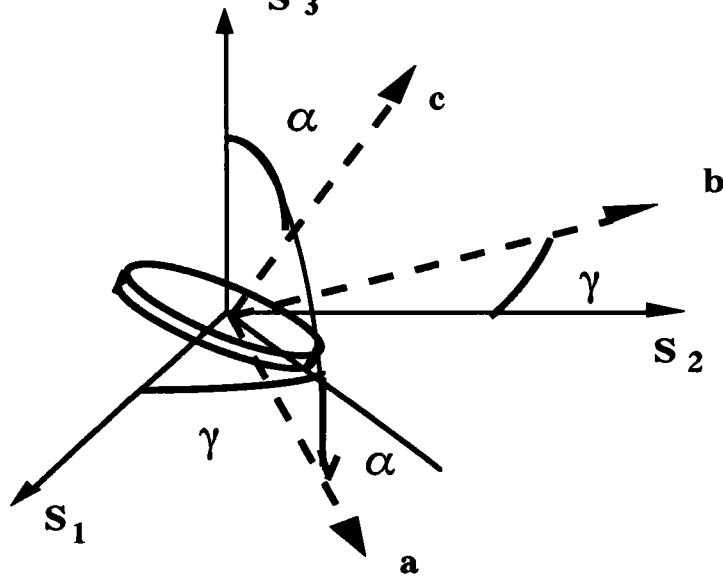


Figure IV-24 : Orientation du disque dans le repère macroscopique.

L'expression du tenseur d'Eshelby S_{ijkl} dans le repère macroscopique et son injection dans l'équation (IV-10) nous donne la déformation moyenne dans la direction N^h de mesure

$$\varepsilon_{\varphi\psi}^M = \frac{-f}{1-f} \frac{E^P}{2} \left[A + B \sin^2 \psi + C \sin \psi \cos \psi \right] \quad \text{avec } \gamma = \varphi = 0 \quad (\text{IV-23})$$

avec

$$A = \left[3 + \frac{\nu}{1-\nu} - \frac{45}{32(1-\nu)} \pi \frac{c}{a} \right] \cos^4 \alpha + \left[5 + \frac{\nu}{1-\nu} - \frac{87-48\nu}{16(1-\nu)} \pi \frac{c}{a} \right] \cos^2 \alpha$$

$$- 2 + \frac{31-32\nu}{32(1-\nu)} \pi \frac{c}{a}$$

$$B = \left[3 + \frac{\nu}{1-\nu} - \frac{45}{32(1-\nu)} \pi \frac{c}{a} \right] \cos^4 \alpha + \left[5 + \frac{\nu}{1-\nu} - \frac{87-48\nu}{16(1-\nu)} \pi \frac{c}{a} \right] \cos^2 \alpha$$

$$+ 2 + \frac{\nu}{1-\nu} + \frac{27}{32(1-\nu)} \pi \frac{c}{a}$$

$$C = 2 \cos \alpha \sin \alpha \left\{ 2 + \frac{\nu}{1-\nu} - \frac{75-24\nu}{32(1-\nu)} \pi \frac{c}{a} - 3 \left[1 + \frac{\nu}{1-\nu} - \frac{45}{32(1-\nu)} \pi \frac{c}{a} \right] \cos^2 \alpha \right\}$$

Le terme C, multiplié par $\sin \Psi$ est responsable du dédoublement qui dépend de l'angle α et du rapport c/a . Il apparaît dans cette équation que le dédoublement est nul pour un angle α égal à $0^\circ + k \pi/2$. Les courbes de déformations simulées directement à partir de l'équation (IV-9), pour $\varphi = 0, 45$ et 90° , $c/a = 0.1$ et $E_{33}^P = 0.1$, permettent de déterminer les contraintes des figures IV-25 et IV-26 à partir de la méthode triaxiale de Dölle et Hauk [48].

Cette méthode permet de déterminer le tenseur des contraintes globales en fonction de l'angle α d'inclinaison du disque dans le plan macroscopique (1,3). L'introduction des variables

$$a_1 = \frac{\varepsilon_{\varphi \psi^{++}} + \varepsilon_{\varphi \psi^{-}}}{2} = \frac{1+\nu}{E} \left[\sigma_{11} \cos^2 \varphi + \sigma_{12} \sin 2\varphi + \sigma_{22} \sin^2 \varphi \right] \sin^2 \Psi + \frac{1+\nu}{E} \sigma_{33} - \frac{\nu}{E} (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}) \quad (\text{IV-24})$$

$$a_2 = \frac{\varepsilon_{\varphi \psi^{+-}} - \varepsilon_{\varphi \psi^{-}}}{2} = \frac{1+\nu}{E} \left[\sigma_{13} \cos \varphi + \sigma_{23} \sin \varphi \right] \sin |2\Psi|$$

conduit à un système de quatre équations à quatre inconnues en fonction des pentes et des ordonnées à l'origine des droites $a_1 = f(\sin^2 \Psi)$ et $a_2 = f(\sin 2\Psi)$ pour différents angles φ . Les pentes des courbes $a_1 = f(\sin^2 \Psi)$ conduisent aux contraintes σ_{11} , σ_{12} , σ_{22} et σ_{33} celles des courbes $a_2 = f(\sin 2\Psi)$ permettent de calculer les contraintes σ_{13} et/ou σ_{23} .

Les figures IV-25 et IV-26 montrent l'évolution des contraintes non nulles pour α variant de 0 à 180° , dans le cas d'un grenailage normal et d'un grenailage incliné. On peut noter sur ces figures la forte valeur de la composante σ_{33} que l'on suppose en général nulle pour l'application de la loi des $\sin^2 \Psi$. Notons également que l'introduction de la composante de cisaillement plastique accentue le cisaillement; il n'y a plus d'inversion du signe du dédoublement avec l'angle α . Elle modifie également la symétrie des courbes par rapport à $\alpha = 90^\circ$.

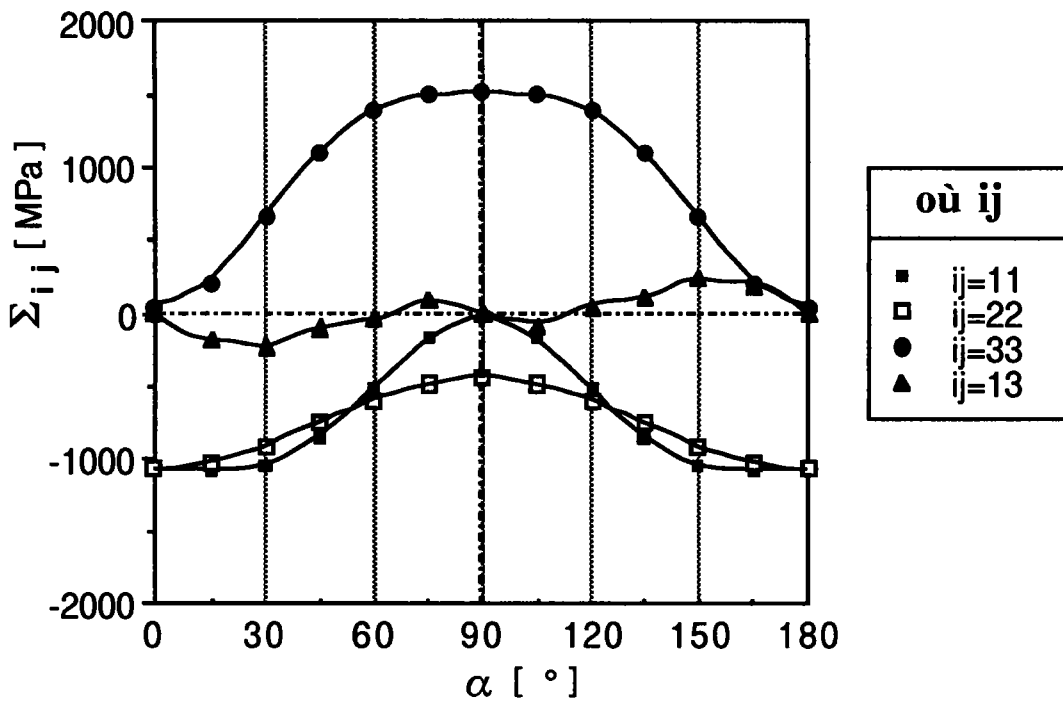


Figure IV-25 : Contraintes macroscopiques après grenailage normal.

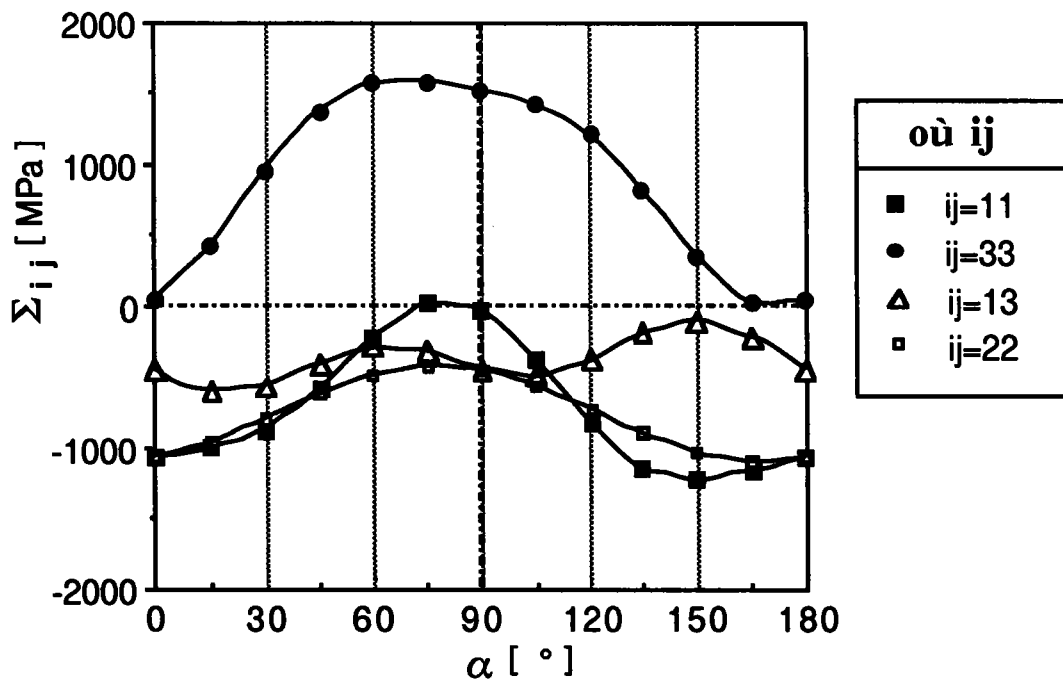


Figure IV-26 : Contraintes macroscopiques après grenailage incliné.

Il est important de noter également que des valeurs moyennes de σ_{33} spécifiques pour chaque phase pourront exister dans un matériau monophasé composé de disques (plaquettes de cémentite par exemple). Cette description pourrait correspondre à un acier eutectique à constituants lamellaires ou sous forme de plaquettes et il paraît donc envisageable de trouver des composantes σ_{33} dans des tôles d'acier laminées. Il est dans ce cas inconcevable d'utiliser la détermination biaxiale de l'état de contraintes dans l'échantillon.

IV.2.2.4. Conclusions

Le dédoublement des courbes $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2 \Psi)$ est généralement attribué à des traitements de surface du type rectification, grenailage, tournage, ..., qui introduisent des composantes de cisaillement en surface et qui engendrent un décalage entre le repère de l'échantillon et le repère principal des contraintes. Le modèle simple d'Eshelby-Kröner permet une simulation quantitative de tous les effets du dédoublement.

Nous avons montré également que la microstructure du matériau, et en l'occurrence la présence de plaquettes dures pouvait également être à l'origine de ces dédoublements sans contrainte de cisaillement en surface. Les contraintes calculées à partir des courbes $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2 \Psi)$ suivant l'angle d'inclinaison des plaquettes mettent en évidence l'apparition de contraintes normales σ_{33} pour un angle α non nul. Il est donc possible de déterminer des contraintes normales dans une tôle laminée contenant des grains de perlite lamellaire. La détermination classique des contraintes résiduelles à l'aide de la loi des $\sin^2 \Psi$, en négligeant σ_{33} , conduirait à une estimation fautive des contraintes macroscopiques dans d'autres directions.

Chapitre V

V. Conclusions

V. Conclusions

Les études antérieures sur le modèle autocohérent élastoplastique, en considérant un comportement élastique local isotrope, ont permis de prévoir le comportement effectif des polycristaux monophasés cubiques centrés et cubiques faces centrées macroscopiquement isotropes et anisotropes. L'accord entre expériences et calculs est remarquable pour la prévision des surfaces de plasticité après des prédéformations en traction et en cisaillement, et pour la prévision des textures de déformation.

Dans ce travail, nous nous intéressons plus particulièrement au calcul des grandeurs locales (contraintes, déformations) dans les constituants des polycristaux microhétérogènes. La diffraction des rayons X est une méthode d'investigation des déformations et contraintes internes largement utilisée qui permet de valider nos calculs. Cette méthode s'applique de façon parfaite dans le cas de matériau isotrope ou macroscopiquement isotrope, dans le domaine élastique. Les anomalies qui apparaissent dans le cas contraire rendent la détermination des contraintes très délicate, voire fautive. Après avoir détaillé l'influence des hétérogénéités élastiques et inélastiques sur la mesure des déformations élastiques par diffraction des rayons X au travers de l'équation intégrale, nous avons validé le modèle autocohérent par la simulation des courbes de déformations $\epsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2\Psi)$ à partir des déformations locales calculées pour des chargements macroscopiques dans le domaine élastique. Ces courbes montrent la linéarité de la loi des $\sin^2\Psi$, quel que soit le plan $\{hkl\}$, pour un matériau macroscopiquement isotrope, et ce sans approximation pour effectuer les transitions d'échelles entre grandeurs microscopiques et grandeurs macroscopiques. De même, la présence d'une texture cristallographique ne modifie pas la linéarité des courbes pour les plans $\{h00\}$ et $\{hhh\}$. Par contre, pour des plans différents, les courbes reproduisent parfaitement l'évolution mesurée. Le modèle autocohérent permet également de montrer l'influence de l'orientation des grains sur les contraintes internes du deuxième ordre responsables des anomalies, et notamment l'influence de la rotation β autour de la normale de mesure pour les grains du volume diffractant. Il permet également de d'isoler l'influence d'une texture morphologique qui induit des non linéarités dans les courbes pour les plans $\{h00\}$ et $\{hhh\}$ qui n'a jamais fait l'objet d'études spécifiques.

L'étude élastoplastique, chapitre IV, permet de montrer la validité du modèle autocohérent à

différents points de vue pour des matériaux cubiques centrés mono- et polyphasés, mais également de mettre en évidence l'importance de la physique du mode de déformation liée à l'orientation cristallographique sur le développement des contraintes résiduelles.

Nous étudions, dans la première partie, un acier doux déformé en traction simple. L'association de chaque orientation cristallographique et des champs locaux de contraintes et de déformations permet d'étudier les champs de contraintes résiduelles pour des grains d'orientation particulière par rapport au repère de chargement. Nous montrons de cette manière que l'écroutissage de ces grains suivant la direction de traction est conforme aux observations faites sur des monocristaux.

Le calcul de l'énergie bloquée globale ou de la fraction d'énergie bloquée est conforme aux observations expérimentales et il montre que l'énergie élastique bloquée représente 30% du travail de déformation plastique en début de plastification.

La représentation de l'énergie bloquée locale sous la forme de figure de pôles ou de Fonction de Distribution des Orientations montre l'importance de l'orientation des systèmes de glissement par rapport à la direction de sollicitation et l'effet secondaire de la texture cristallographique sur les contraintes résiduelles.

Le calcul des contraintes résiduelles locales permet de simuler les mesures de déformations élastiques par diffraction des rayons X. La comparaison des courbes calculées et mesurées montre que le modèle permet de retrouver les évolutions caractéristiques des courbes $\varepsilon_{\phi\Psi} = f(\sin^2 \Psi)$

en fonction du plan $\{hkl\}$ de diffraction dans les matériaux cubiques centrés monophasés. Il apparaît que les courbes pour les plans de glissement de type $\{211\}$ et $\{110\}$ ne présentent que des oscillations autour d'une déformation nulle, tandis que pour d'autres plans les courbes présentent des pentes positives ou négatives. La détermination des contraintes par la loi des $\sin^2 \Psi$ conduirait à des contraintes macroscopiques nulles pour les plans de glissement et des contraintes macroscopiques de traction ou de compression pour les autres plans. L'application de cette loi semble donc erronée après déformations plastiques. La même étude pour un matériau sans texture initiale montre une absence d'oscillation pour les plans de glissement et des pentes similaires pour les autres plans cristallins. L'absence de certaines orientations au comportement très différent modifie la moyenne sur le volume diffractant en présence de texture et provoque l'apparition des oscillations caractéristiques.

Dans la deuxième partie, la présence d'une seconde phase dure donne naissance à des contraintes résiduelles spécifiques à chaque phase qui se manifeste comme des contraintes du premier ordre

nulles en moyenne sur le polycristal. Les courbes $\varepsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2 \Psi)$ calculées pour un acier du type XC45 montrent la superposition des contraintes résiduelles dues à la présence de la phase dure et dues aux incompatibilités de la déformation plastique. La détermination des contraintes relatives à chaque phase se heurte aux mêmes problèmes que dans le cas du matériau monophasé.

Le calcul pour le matériau biphasé, constitué de ferrite et de cémentite, conduit également à la détermination des contraintes résiduelles dans la phase cémentite, considérée comme globulaire, qui sont très proches de la réalité.

La dernière partie de cette étude a également permis d'expliquer les phénomènes de dédoublement de la loi des $\sin^2 \Psi$ dans les matériaux biphasés après traitements de surface à partir du modèle simple d'Eshelby-Kröner. Elle montre que le dédoublement peut également avoir une origine microstructurale (forme des constituants). On peut ainsi s'attendre à retrouver des dédoublements dans un acier laminé composé de cémentite lamellaire et à déterminer des contraintes normales à la surface que l'on suppose en général nulles pour la détermination des contraintes internes par la loi des $\sin^2 \Psi$.

Ce travail nous a permis de valider à la fois le calcul du comportement global des polycristaux CFC et CC à partir des grandeurs locales dans le domaine élastiques et le calcul des contraintes et déformations résiduelles après déformations plastiques en traction simple.

Le modèle autocohérent est donc un outil intéressant pour le développement de nouveaux matériaux tant dans le domaine élastique que dans le domaine plastique.

Le calcul des grandeurs locales permet également d'étudier les problèmes d'endommagement et de rupture.

Le modèle permet également d'étudier les différentes sources d'hétérogénéités en les isolant par construction des matériaux modèles. Il devrait donc permettre de mieux comprendre les phénomènes et participer au développement de nouvelles méthodes de mesures plus appropriées.

Figure II-1 : Mise en évidence des volumes irradiés V_I et diffractants V_D .	13
Figure II-2 : Représentation de la direction de mesure dans le repère macroscopique.	14
Figure II-3 : Superposition des contraintes internes de types I, II et III sur un domaine couvrant plusieurs grains [50].	24
Figure II-4 : Définition des angles d'Euler.	30
Figure II-5 : Comparaison des seuils de plasticité calculés et expérimentaux pour des prédéformations en traction simple et en cisaillement de matériaux CFC.	31
Figure II-6 : Figures de pôles inverses représentant des textures de traction (a) et de compression (b) calculées par le modèle autocohérent pour des matériaux CFC ($E^P = 70\%$).	32
Figure II-7 : Comparaison des textures calculées et mesurées pour un laminage jusqu'à une déformation plastique équivalente de 90% pour un matériau CFC.	33
Figure II-8 : Evolution de la fraction d'énergie bloquée globale lors d'un essai de traction simple d'un matériau CFC.	35
Figure II-9 : Evolution de l'énergie bloquée élastique globale sous la forme de contraintes du deuxième ordre pour un chargement séquentiel : traction + compression (CFC).	36
Figure III-1 : Evolution des courbes $\epsilon_{\varphi\Psi} = f (\sin^2 \Psi)$ pour un polycristal de fer pur macroscopiquement isotrope ($\Sigma_{11} = 100\text{MPa}$).	44
Figure III-2 : Evolution des courbes moyennes $\epsilon_{\varphi\Psi} = f (\sin^2 \Psi)$ pour un polycristal de cuivre macroscopiquement isotrope ($\Sigma_{11} = 100\text{MPa}$).	45
Figure III-3 : Influence des contraintes d'ordre II sur la largeur du pic de diffraction.	45
Figure III-4 : Evolution des courbes $\epsilon_{\varphi\Psi} = f (\sin^2 \Psi)$ pour un polycristal de fer possédant une forte texture de laminage ($\Sigma_{11} = 100\text{MPa}$).	49
Figure III-5 : Influence d'une texture cristallographique sur la largeur du pic de diffraction.	49

- Figure III-6 : Evolution des courbe $\epsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2 \Psi)$ pour un polycristal de cuivre possédant une forte texture de laminage ($\Sigma_{11} = 100\text{MPa}$). 50
- Figure III-7 : Comparaison entre courbes $\epsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2 \Psi)$ mesurées et calculées par le modèle autocohérent élastique (SC). 51
- Figure III-8 : Evolution des courbes $\epsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2 \Psi)$ suivant l'orientation β autour de la normale au plan (211) de mesure. 52
- Figure III-9 : Evolution de la déformation $\epsilon_{\varphi\Psi}$ en fonction de la rotation β autour de la direction de mesure pour les plans (211) à φ et Ψ donnés. 53
- Figure III-10 : Evolution des courbes $\epsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2 \Psi)$ pour deux types de morphologies : (1) - $a=10, b=1, c=1$; (2) - $a=1, b=10, c=10$. 54
- Figure IV-1 : Eprouvette de traction. 61
- Figure IV-2 : Courbes de traction expérimentale et simulée pour l'acier IFHR 400. 66
- Figure IV-3a : Evolution des contraintes résiduelles pour des cristallites dont les normales $\{100\}$ sont parallèles à la direction de traction. 67
- Figure IV-3b : Evolution des contraintes résiduelles pour des cristallites dont les normales $\{110\}$ sont parallèles à la direction de traction. 67
- Figure IV-3c : Evolution des contraintes résiduelles pour des cristallites dont les normales $\{111\}$ sont parallèles à la direction de traction. 68
- Figure IV-4 : Evolution des contraintes internes (traits fins) et résiduelles (gras) suivant l'orientation des grains par rapport à l'axe de traction. 69
- Figure IV-5 : Fraction d'énergie bloquée globale calculé pour le polycristal modèle représentant l'acier doux IFHR 400. 70
- Figure IV-6 : Distance interréticulaire d mesurée entre plans $\{211\}$ en fonction de la déformation plastique en traction simple pour des tôles d'acier doux IFHR 400. 77
- Figure IV-7 : Distance interréticulaire d mesurée entre plans $\{310\}$ en fonction de la déformation plastique en traction simple pour des tôles d'acier doux IFHR 400. 78
- Figure IV-8 : Evolution calculée des courbes $\epsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2 \Psi)$ dans la direction de traction en fonction de la déformation plastique en traction simple pour des matériaux sans texture. 80

- Figure IV-9 : Evolution calculée des courbes $\epsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2\Psi)$ dans la direction de traction en fonction de la déformation plastique en traction simple pour des matériaux possédant une texture de laminage. 81
- Figure IV-10 : Comparaison des courbes $\epsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2\Psi)$ mesurées et calculées dans la direction de traction pour des plans {211} et {310}. 84
- Figure IV-11 : Evolution calculée des courbes $\epsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2\Psi)$ dans la direction de traction en fonction des plans de diffraction après déformation en traction de 5%. $\varphi = 0^\circ$. 85
- Figure IV-12 : Evolution calculée des courbes $\epsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2\Psi)$ dans la direction transverse après traction simple dans la direction de laminage jusqu'à 5%. (ST pour sans texture). 86
- Figure IV-13 : Schématisation des composants de l'acier XC45. 88
- Figure IV-14 : Evolution des contraintes internes moyennes calculées dans la ferrite et la perlite d'un acier XC45. 89
- Figure IV-15 : Evolution des contraintes moyennes calculées dans les constituants d'un XC45 en fonction de la déformation plastique en traction simple. 91
- Figure IV-16 : Courbe de traction d'un acier à 0.45% de carbone (I), contraintes mesurées pendant l'essai dans la ferrite (II) et contraintes résiduelles dans la ferrite (III). 91
- Figure IV-17 : Evolution des déformations en fonction de $\sin^2\Psi$ dans la ferrite. 93
- Figure IV-18 : Mise en évidence des contraintes en surface pendant rectification. 95
- Figure IV-19 : Evolution mesurée des courbes $\epsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2\Psi)$ dans la direction de grenailage ($\varphi=0^\circ$) et dans la direction transverse ($\varphi=90^\circ$). 100
- Figure IV-20 : Influence de la fraction volumique des deux phases sur les courbes $\epsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2\Psi)$ 101
- Figure IV-21 : Signe du dédoublement dans les deux phases, ferrite et cémentite d'un acier. 101
- Figure IV-22 : Evolution calculée des courbes $\epsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2\Psi)$ en fonction de la fraction volumique. 103
- Figure IV-23 : Influence calculée du taux de cisaillement sur les courbes $\epsilon_{\varphi\Psi} = f(\sin^2\Psi)$. 103

Figure IV-24 : Orientation du disque dans le repère macroscopique.	105
Figure IV-25 : Contraintes macroscopiques après grenailage normal.	107
Figure IV-26 : Contraintes macroscopiques après grenailage incliné.	107

Tables des planches	page
Planche IV-1 : Figures de pôles expérimentales.	62
Planche IV-2 : Fonctions de distribution des orientations à Φ_1 constant.	63
Planche IV-3 : Figures de pôles recalculées à partir du matériau modèle (DL --> 2).	64
Planche IV-4: Figures de pôles d'énergie bloquée moyenne d' un matériau sans texture après traction simple ($E^P = 5\%$ suivant DL --> 2)	72
Planche IV-5 : Figures de pôles d'énergie bloquée moyenne de l'acier IFHR 400 après traction simple ($E^P = 5\%$ suivant DL --> 2)	73
Planche IV-6a: FDO d'énergie bloquée pour un matériau sans texture après traction simple ($E^P = 5\%$ suivant DL).	74
Planche IV-6b: FDO d'énergie bloquée pour l'acier IFHR 400 modèle après traction simple ($E^P = 5\%$ suivant DL).	75

Tableau III-1 : Constantes élastiques et anisotropie A des monocristaux.	43
Tableau III-2 : Constantes élastiques radiocristallographiques pour un matériau recristallisé calculées par différents modèles et mesurées (SC : Calcul self-consistent)	46
Tableau III-3 : Constantes élastiques radiocristallographiques pour des matériaux polycristallins recristallisés: comparaison entre mesures expérimentales et valeurs calculées par le modèle autocohérent élastoplastique (SC). (en 10^{-6} MPa ⁻¹).	46
Tableau IV-1 : Caractéristiques chimiques de l'acier IFHR 400.	60
Tableau IV-2 : Caractéristiques physiques des polycristaux modèles.	65
Tableau IV-3 : plan des mesures effectuées.	76
Tableau IV-4 : Estimation des contraintes résiduelles pour les matériaux modèles et l'acier IFHR 400.	86
Tableau IV-5: Comparaison entre mesures et calls des contraintes dans un XC45, pour un essai de traction simple (EP = 5%).	92
Tableau IV-6 : Contraintes calculées dans la ferrite de l'acier XC 45 à partir des courbes $\varepsilon_{\varphi\Psi} = f (\sin^2\Psi)$ dans la ferrite.	93

Références bibliographiques

- [1] Voigt, W., *Wie. Ann.*, **38**, pp 573-587 (1889).
- [2] Reuss, A., *Z. Angew. Math. Mech.*, **9**, pp 49-58 (1929).
- [5] Kröner, E., *Z. Phys.*, **151**, pp 504-518 (1958).
- [3] Hill, R., *The Elastic Behaviour of Cristalline Aggregate*, *Proc. Phys. Soc.*, **65-A**, 349-354, (1952).
- [4] Eshelby, J.D., *Proc. Roy. Soc.*, **A241**, 376-396 (1957).
- [5] Kröner, E., *Acta Metall.*, **9**, pp 155-165 (1961).
- [6] Kröner, E., "Statistical Modelling", Elsevier Appl. Science London, New York, pp 229-291 (1986).
- [7] Mandel, J., *Int. J. Solids Structures*, **17**, 873-882 (1981).
- [8] Dederichs, P. H., Zeller, R., *Zeit. Phys.*, **259**, 103-113 (1973).
- [9] Berveiller, M., Zaoui, A., *J. Eng. Mat. Tech.*, 106 (1984).
- [10] Lipinski, P., Berveiller, M., *Int. J. Plasticity*, **5**, 149-172 (1989).
- [11] Macherauch, E., Mülller, P., *Z. Angew. Phys.*, **13**, 305 (1961).
- [12] J.M., Diani, M. Berveiller, H. Sabar, 7th Int. Symp. on Continuum Models of Discrete Systems, CMDS 7 - Paderborn june 1992.
- [13] Lipinski, P., Krier, J., Berveiller, M., *Elastoplasticité des Métaux en Grandes Déformations : Comportement Global et Evolution de la Structure Interne*, *Revue Phys. Appl.*, **25** (1990).
- [14] Bunge, H.J., *Three Dimensionnal Texture Analysis*, *Int. Materials Review*, **32**, 265-291 (1987).
Bunge, H. J., "Mathematische Methoden der Textur Analyse", Berlin Akademie Verlag.
- [15] Krier, J., *Rapport de D.E.A., Université de Metz* (1988).
- [16] Chrysochos, A., *Dissipation et blocage d'énergie lors d'un écrouissage en traction simple*, Thèse Université de Montpellier (1987).
- [17] Bever, M. B., Holt, D. L., Titchener, A. L., *Prog. in Mat. Sci.*, **17**, 1-191 (1973).
- [18] Williams, R. O., In "Experimental Methodes of Materials Research", H. Hermann Ed. Intersciences (1967).
- [19] Bailey, J. E., Hirsch, P. B., *Phil. Mag.*, **7**, 485 (1960).
- [20] Seeger, A., Kronmuller, H., *Phil. Mag.*, **7**, 897 (1962).
- [21] Corvasce, F., Lipinski, P., Berveiller, M., *Colloque Mecamat Besançon France*, 225-236 (1988).

- [22] Dölle, H., Hauk, V., Z. Metalkde, **69**, 410 (1978).
 Dölle, H., Hauk, V., Kockelmann, H., Proc. of 5th ICOTOM Aachen (1978).
 Hauk, V., Sesemann, H., Z. Metalkde, **67**, 646 (1976).
- [23] Dölle, H., Cohen, J.B., Evaluation of Residual Stresses in Textured Cubic Metals,
 Metal. Trans. A, **11A**, 831-836 (1980).
- [25] Nagashima, S., Shiratori, M., Fujiu, T., The Estimation of Elastic Constants for the X-Ray Analysis of Textured Materials, Proc. of ICOTOM6, Tokyo, Japan sep. 1981, 1148-1156.
- [26] Dölle, H., Hauk, V., Zegers, H., Berechnete und Gemessene REK und Gitterdehnungsverteilungen in Texturierten Stählen, Z. Metalkde, **69**, 766 (1978).
 Dölle, H., Hauk, V., Röntgenographische Ermittlung von Eigenspannungen in Texturierten Werkstoffen, Z. Metalkde, **70**, H10, 682-685 (1979).
- [27] Hauk, V., Krug, W. K., Oudelhoven, R.W.M., Pintschovius, L., Calculation of Lattice Strains in Crystallites with an Orientation Corresponding to the Ideal Rolling Texture of Iron, Z. Metalkde, **79**, 159-163 (1990).
- [24] Castex, L., Lebrun, J. L., Maeder , G., Sprael, J.M., Détermination des Contraintes Résiduelles par Diffraction des Rayons X, Publications Scientifiques et Techniques ENSAM, 61,99-100 (1981).
- [28] Brakman, C.M., J. Appl. Cryst., **16**, 325-340 (1983), **18**, 279-295 (1985)
- [29] Barral, M., Sprael, J.M., Maeder, G., Stress Measurements by X-Ray Diffraction on Textured Material Characterised by its ODF, in Eigenspannungen: Entstehung-Messung-Bewertung, Ed. Macherauch E. and Hauk V., Band 2, 31 (1983).
 Barral, M., Lebrun, J.L., Sprael, J. M., Maeder, G., Met. Trans. A, **18A**, 1229-1238 (1987).
- [30] Serryus, W., Van Houtte, P., Aernoudt, E., in Residual Stress in Science and Technologie, Ed. Macherauch E. and Hauk V., DGM mbH, 417-426 (1987).
- [31] Noyan, I.C., Nguyen, T., Oscillations in Interplanar Spacing vs. $\sin^2\Psi$: a FEM Analysis, Adv. in X-ray Anal., **31**, 191-204 (1988).
- [32] Hauk, V., Veassen, G., Röntgenographische Spannungsermittlung an Texturierten Stählen, in Eigenspannungen : Entstehung-Messung-Bewertung, E. Macherauch & V. Hauk, Vol. 2, 9-30 (1983).
 Hauk, V., Herlach, D., Sesemann, H., Über nichtlineare Gitterebenenabstandsverteilung in Stählen, ihre Entstehung, Berechnung und Berücksichtigung bei der Spannungsermittlung, Z. Metalkde **66**, 734 (1975).

- [33] Masing, G., Heyn, E., *Wiss. Veröf. Siemens-Konz.*, **3**, 231 (1923), **5**, 135 (1926).
- [34] Greenough, G.B., *Proc. Roy. Soc. London*, **A197**, 556, (1949).
- [35] Taylor, G.I., *J. Inst. Metals*, **62**, 307 (1938).
- [36] Hill, R., *J. Mech. Phys. Solids*, **13**, 89-97 (1965).
- [37] J.W. Hutchinson, *Proc. Roy. Soc. A* **319**, 247 (1970).
- [38] Noyan, I.C., Nguyen, L.T., Effect of Plastic Deformation on scillations in “d” vs. $\sin^2\Psi$ Plots: A FEM Analysis, *Adv. in X-Ray Anal.*, **32** (1989).
- [39] Bollenrath, F., Hauk, V. Ohly, W., Mikroeigenspannungen in Plastisch verformten Zugproben aus Eisen un Aluminiumlegierungen, *Z. Metalkde* **57**, 464 (1966).
Hauk, V., Nikolin, H.J., Pintschovius, L., Evaluation of Deformation Residual Stresses Caused by Uniaxial Plastic Strain of Ferritic and Ferritic-austenitic Steels, *Z. Metalkde*, **81**, H8, 556-569 (1990).
- [40] François, M., Détermination de Contraintes Résiduelles sur des Fils d’Acier Eutectoïde de Faible Diamètre par Diffraction des Rayons X, Thèse de doctorat ENSAM (1991).
- [41] B. Jaoul, Etude de la plasticité et applications aux métaux, DUNOD.
- [42] Schmitt, C., à paraitre (1992).
- [43] Kolb, K., Macherauch, E., Die Eigenspannungsausbildun in Verformten Stählen, *Archiv für das Eisenhüttenwesen*, **36**, 9-27 (1965).
- [44] Noyan, I.C., Cohen, J.B., “Residual Stress Measurement by Diffraction and Interpretation”, Springer Verlag, 223-229 (1987).
- [45] Wakabayashi, M., Nakayama, M., Nagata, A., *J. Japan Soc. Prec. Eng.*, **43**, 661 (1977).
- [46] Hanabusa, T., Fujiwara, H., *Soc. Mat. Sci. Japan*, **75**, 1 (1980).
- [47] Mura, T., *Micromechanics of defects in solids*, Martinus Nijhoff Publishers The Hague/Boston/London, 63-75 (1982).
- [48] H., Dölle, V., Hauk, *Z. für Metalkde*, **68**, 728 (1977).
- [49] Reubrez, E., Rapport annuel avancement thèse LEDEPP SOLLAC 1991.

ANNEXE 1:

Création du polycristal modèle

Pour pouvoir effectuer des simulations en rapport avec le comportement réel du polycristal, il est nécessaire de construire un polycristal modèle statistiquement représentatif des orientations que présente le matériau réel.

Dans le cas d'un matériau isotrope, il suffit d'utiliser trois variables aléatoires indépendantes distribuées uniformément sur les intervalles $[0, 2\pi]$, $[-1, 1]$, $[0, 2\pi]$ pour chaque orientation.

Pratiquement, on utilise trois générateurs de nombres aléatoires donnant trois valeurs u , v et w comprises entre 0 et 1, un grain du pseudo-matériau aura alors l'orientation définie par :

$$\Phi_1 = 2\pi u \quad ; \quad \Phi = \text{Arccos}(2v - 1) \quad ; \quad \Phi_2 = 2\pi w \quad (1)$$

Pour un matériau texturé il est nécessaire de passer par la Fonction de Distribution des Orientations (FDO) pour déterminer le pseudo-matériau. Le problème étant maintenant d'exploiter le résultat discrétisé de la transformation de figures de pôles expérimentales. L'ODF est donnée sous la forme de triplets d'Euler, les angles variant de 5° en 5° permettent de définir 6859 orientations auxquelles est associée une densité d'orientations FDO(g).

L'utilisation sous cette forme ne permet pas directement de retrouver les figures de pôles expérimentales symétriques et de retraduire le comportement mécanique du matériau. Nous avons ensuite recomposé l'espace d'Euler complet à partir des symétries cristallines qui nous donne 186264 orientations. Une simulation sur un polycristal modèle de plus de 5000 cristallites n'est pas envisageable en raison du temps que nécessiterait un tel calcul. Pour fixer les idées, le calcul pour un polycristal de 5000 grains dont nous simulerions une déformation en traction simple jusqu'à une déformation plastique équivalente de 1% prendrait 24 heures. Se pose donc le problème du choix de N orientations représentatives de la texture réelle du matériau.

Une des méthodes envisagées consiste à tracer une courbe $\text{FDO}(g) = f(g)$ monotone décroissante. Il suffit ensuite de découper la surface sous cette courbe en N surfaces égales et de déterminer l'orientation h centrale et $\text{FDO}(h)$. Cette méthode, bien que permettant de retrouver les figures de pôles expérimentales, ne retraduit pas de façon suffisante le comportement

mécanique du matériau, notamment en ce qui concerne le coefficient de Lankford, rapport des déformations "longitudinales" et "normales".

Finalement, pour un matériau texturé, la méthode dans le cas isotrope a été étendue en utilisant des Fonctions de Répartition des Orientations par M. François [40]. Ces fonctions permettent de transformer une distribution quelconque exprimée par sa densité $f(x)$ en une distribution uniforme sur $[0, 1]$. Soit f la densité de probabilité d'une variable aléatoire X définie sur l'intervalle $[a, b]$. La fonction de répartition de X est définie par $F(x) = p(X \leq x)$, on peut alors écrire

$$F(x) = \int_a^x f(u) du \quad (2)$$

La fonction F est croissante et la variable aléatoire définie par $Y = F(x)$ est uniforme sur $[0,1]$. En étendant cette définition à trois dimensions, on peut transformer la FDO (qui est une densité) en distribution uniforme sur $[0,1] \times [0,1] \times [0,1]$.

Si FDO $(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$ est la fonction de densité du triplet $(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$, on peut définir la Fonction de Densité Marginal du couple (φ_1, Φ) par

$$FDM_{\varphi_1, \Phi}(\varphi_1, \Phi) = \int_0^{\varphi_{2max}} FDO(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) d\varphi_2 \quad (3)$$

La densité conditionnelle de φ_2 sachant que $\varphi_1 = \varphi_{10}$ et $\Phi = \Phi_0$ est

$$FDO(\varphi_2/\varphi_1=\varphi_{10}, \Phi=\Phi_0) = \frac{FDO(\varphi_{10}, \Phi_0, \varphi_2)}{FDM_{\varphi_{10}, \Phi_0}(\varphi_{10}, \Phi_0)} \quad (4)$$

La fonction de répartition conditionnelle de φ_2 est donc

$$FRO(\varphi_2/\varphi_1=\varphi_{10}, \Phi=\Phi_0) = \frac{\int_0^{\varphi_2} FDO(\varphi_{10}, \Phi_0, \varphi_2) d\varphi_2}{FDM_{\varphi_{10}, \Phi_0}(\varphi_{10}, \Phi_0)} \quad (5)$$

De la même manière, on peut calculer la densité marginale de φ_1 par

$$\text{FDM}_{\varphi_1}(\varphi_1) = \int_0^{\Phi_{\max}} \text{FDM}_{\varphi_1 \Phi}(\varphi_1, \Phi) \sin \Phi \, d\Phi \quad (6)$$

La fonction de répartition conditionnelle de Φ sera donc

$$\text{FRO}(\Phi/\varphi_{10}) = \frac{\int_0^{\Phi} \text{FDM}_{\varphi_1 \Phi}(\varphi_{10}, \Phi) \sin \Phi \, d\Phi}{\text{FDM}_{\varphi_1}(\varphi_{10})} \quad (7)$$

La fonction de répartition de φ_1 sera de même

$$\text{FRO}(\varphi_{10}) = \frac{\int_0^{\varphi_1} \text{FDM}_{\varphi_1}(\varphi_1) \, d\varphi_1}{\int_0^{\varphi_1} \text{FDM}_{\varphi_1}(\varphi_1) \, d\varphi_1} \quad (8)$$

L'ensemble des trois fonctions de répartition $\text{FRO}(\varphi_1)$, $\text{FRO}(\Phi/\varphi_1)$ et $\text{FRO}(\varphi_1/\varphi_2, \Phi)$ ainsi définies permettent de transformer la FDO en distribution uniforme sur $[0,1] \times [0,1] \times [0,1]$. A tout triplet de nombre (u, v, w) compris entre 0 et 1, on peut faire correspondre un triplet d'angles d'Euler définissant un cristallite.

Le pseudo-matériau recherché peut donc être construit en répétant N fois la procédure suivante :

- génération de trois nombres aléatoires u, v, w uniformément répartis sur $[0,1]$

-détermination de φ_1 tel que $\text{FRO}(\varphi_1) = u$

-détermination de Φ tel que $\text{FRO}(\Phi/\varphi_1) = v$

-détermination de φ_2 tel que $\text{FRO}(\varphi_1/\varphi_2, \Phi) = w$

Le traitement informatique de cette procédure par E. Reubrez [49] permet de définir un polycristal modèle qui permet de retrouver les figures de pôles expérimentales et de retrouver le comportement mécanique réel. De plus, cette méthode permet d'affecter la même fraction volumique à tous les grains pour le calcul autocohérent.

Résumé :

Ce travail propose une étude de l'influence des hétérogénéités élastoplastiques sur les champs de contraintes et déformations microscopiques dans les polycristaux mono- et biphasés. Les grandeurs locales sont calculées à l'aide de l'approximation autocohérente de l'équation intégrale cinématique reliant grandeurs locales et globales. Le calcul des déformations dans le domaine élastique permet de mettre en évidence l'origine des contraintes du deuxième ordre et de simuler de façon parfaite les courbes de mesure par diffraction des rayons X pour des matériaux isotropes et présentant des textures cristallographiques et morphologiques.

Les calculs et les mesures de diffraction menés en parallèle pour des déformations plastiques en traction simple montrent que le modèle est également capable de prédire les contraintes résiduelles, leurs évolutions et leurs influences sur les courbes de diffraction.

Le modèle simple de l'inclusion dans une matrice permet d'expliquer qualitativement le dédoublement des courbes de diffraction de matériaux multiphasés lié à des traitements de surface, mais également de le relier à la morphologie des constituants pour des déformations macrohomogènes.

Abstract :

The aim of this work is to study influences of elastoplastic heterogeneities on microscopic stress and strain fields in one- and twophased polycrystals. Local stresses and strains are calculated owing to the self consistent scheme of the cinematic integral equation linking micro- and macroscopic strains.

Elastic strain calculations allow to illustrate second order stresses and to simulate perfectly X-ray diffraction experiments on isotropic materials and materials with crystallographic and morphologic textures.

Parallel calculations and diffraction experiments after tensile plastic strains show that the model is able to predict residual stresses, their evolution during plastic straining, and their influences on X-ray diffraction experiments.

The simple model based on the problem of an inclusion in a matrix allows to explain qualitatively the splitting of X-ray diffraction curves after surface machining in multiphased materials. It's possible to link this effect to the morphology of the constituents for global homogeneous strains.