

École doctorale 353 Sciences pour l'Ingénieur

THÈSE présentée pour l'obtention du grade
de DOCTEUR de l'Université d'Aix-Marseille
Sciences pour l'ingénieur, spécialité mécanique des solides

**Modélisation micromécanique
du comportement viscoplastique d'un polycristal poreux :
application à un acier inoxydable austénitique irradié**

par

Louis JOËSSEL

Soutenue le 15 Octobre 2018, devant le jury composé de

Renald BRENNER	Université Pierre et Marie Curie	Président
Éveline HERVÉ-LUANCO	Université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines	Rapporteur
Kostas DANAS	École Polytechnique	Rapporteur
Yann MONERIE	Université de Montpellier	Examineur
Mihai GĂRĂJEU	Université d'Aix-Marseille	Directeur de thèse
Martín Ignacio IDIART	Université Nationale de La Plata	Codirecteur de thèse
Pierre-Guy VINCENT	Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire	Encadrant de thèse
Lionel GELEBART	CEA	Membre invité
Rodrigue LARGENTON	EDF R&D	Membre invité

Recherches effectuées au Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique (LMA), Marseille,
au Laboratoire de Physique et de Thermomécanique des Matériaux (IRSN), Cadarache
et à l'Université Nationale de La Plata (UNLP), Argentine

Remerciements

Je dois ces trois années d'épanouissement intellectuel à Pierre-Guy Vincent, Mihai Găărăjeu et Martín Idiart, avec qui j'ai pris plaisir à travailler dans les cadres superbes qu'offrent le centre de recherche de Cadarache, la ville de Marseille, ou encore la ville de La Plata. Je ne peux trouver les mots justes pour signifier à cette formidable équipe d'encadrement à quel point ils ont enrichi ma personne ; les quelques remerciements qui leurs sont adressés par la suite restent donc très anecdotiques.

J'aimerais plus particulièrement remercier mon encadrant de thèse Pierre-Guy Vincent pour sa confiance, ses encouragements, et surtout pour avoir orienté ce projet de thèse avec une grande pédagogie. Il a partagé avec moi son savoir-faire en micromécanique, je lui en suis reconnaissant.

Je tiens aussi à exprimer ma gratitude envers mon directeur de thèse Mihai Găărăjeu pour sa disponibilité, et surtout pour m'avoir éclairé sur tant de subtilités mathématiques que je ne soupçonnais pas. J'ai trouvé grâce à lui une grande satisfaction pour les développements mathématiques.

Je souhaite également remercier mon codirecteur de thèse Martín Idiart pour m'avoir fait découvrir certains de ses travaux que je trouve sincèrement remarquables (et même fascinants). Il m'a fait bénéficier de sa générosité intellectuelle pour finalement hisser ce projet au delà de mes ambitions premières.

Je remercie Renald Brenner pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de ma soutenance de thèse. Je remercie également Éveline Hervé-Luanco et Kostas Danas pour avoir accepté de rapporter l'ensemble de mon travail de thèse. Je remercie aussi Yann Monerie, Lionel Gelebart et Rodrigue Largenton d'avoir participé à ce comité de thèse. De manière générale, je remercie tous les membres du jury pour avoir montré de l'intérêt à mon travail, et d'avoir fait de ma soutenance de thèse un moment fort.

Je remercie pour leur accueil tous les membres du Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique à Marseille, où j'ai effectué la majeure partie de ma thèse. Je remercie particulièrement Hervé Moulinec pour ces échanges captivants sur les méthodes numériques et l'informatique en général.

Je remercie tous les membres du Laboratoire de Physique et de Thermomécanique des Matériaux à Cadarache pour leur accueil lors de mes visites hebdomadaires. Je remercie en particulier mes chefs de laboratoire Olivier Marchand puis Nicolas Trégourès pour avoir suivi de près ce projet de thèse.

J'aimerais aussi remercier mon encadrante de stage Hanen Amor pour son soutien dans ma démarche de thèse et surtout pour avoir su alimenter mon goût pour la programmation. Je n'oublie pas l'ensemble de mes professeurs à l'Université Pierre et Marie Curie qui, en plus de m'avoir passionné pour leurs disciplines, ont jusqu'au bout encouragé mon envie de faire une thèse.

Une pensée pour tous mes amis et proches qui m'ont inspiré, peut-être sans le savoir, et encouragé durant cette thèse.

Enfin, je remercie mes parents pour leur soutien inconditionnel.

RÉSUMÉ

MODÉLISATION MICROMÉCANIQUE DU COMPORTEMENT VISCOPLASTIQUE D'UN POLYCRISTAL POREUX : APPLICATION À UN ACIER INOXYDABLE AUSTÉNITIQUE IRRADIÉ

La température élevée et l'irradiation prolongée que subissent les aciers inoxydables austénitiques des internes de cuve des réacteurs à eau pressurisée entraînent potentiellement l'apparition de cavités au sein des grains de la structure polycristalline du matériau considéré. Ces cavités intragranulaires, de forme plutôt sphérique, peuvent modifier les propriétés mécaniques du matériau. Tout d'abord, ce travail de recherche propose de modéliser le comportement viscoplastique de monocristaux poreux, principalement via trois approches différentes. Premièrement, le monocristal poreux est idéalisé comme un assemblage d'une infinité de sphères homothétiques ; deuxièmement, le monocristal poreux est idéalisé comme une microstructure laminée séquentiellement, dont le procédé de laminage est réitéré à l'infini ; troisièmement, le monocristal poreux est idéalisé comme une microstructure périodique dont le comportement est évalué par des simulations numériques basées sur un algorithme de transformées de Fourier rapides. Ensuite, les estimations pour monocristaux poreux sont exploitées via une démarche de double changement d'échelles pour modéliser le comportement viscoplastique d'un polycristal poreux. En vue d'une application à un acier inoxydable austénitique irradié, les paramètres matériau du modèle polycristallin poreux sont identifiés à partir de simulations numériques sur des microstructures périodiques où localement le comportement cristallin est décrit par une loi de comportement spécialement dédiée à cet acier inoxydable austénitique irradié prenant en compte l'évolution des défauts dus à l'irradiation. De manière générale, ce travail cherche à proposer des outils de modélisation innovants, performants, et applicables à une grande variété de configuration cristalline, mais aussi facilement applicables aux aciers inoxydables austénitiques irradiés.

ABSTRACT

MICROMECHANICAL MODELING OF THE VISCOPLASTICITY OF VOIDED POLYCRYSTALS : APPLICATION TO AN IRRADIATED AUSTENITIC STRAINLESS STEEL

Austenitic stainless steels employed as internals in pressurized water reactor vessels may nucleate intragranular voids when exposed to prolonged irradiation and high temperature. The voids, almost spherical in shape, modify the mechanical behavior of the material. This work explores three different approaches in order to model viscoplasticity of voided single crystals. The first approach consists in idealizing the voided crystal as a hollow sphere assemblage made of crystalline material. The second approach consists in idealizing the voided crystal as a sequential laminate of infinite rank obeying an isotropic lamination sequence. The third approach consists in idealizing the voided crystal as a periodic medium with a complex unit cell, and computing the mechanical fields numerically via a Fast Fourier Transform algorithm. Then, the estimates for porous single crystals are used to model the viscoplasticity of voided polycrystals via a double up scaling process. Finally, in order to apply the present model to an irradiated austenitic stainless steel, the constitutive material parameters are identified with numerical simulations on periodic unit cells where locally the constitutive behavior is described by a phenomenological model especially devoted to this irradiated austenitic stainless steel, taking account of the evolution of irradiation defects. As a general rule, this work aims at delivering innovative, high-performance modeling tools, applicable to a wide variety of crystalline materials together with irradiated austenitic stainless steels.

Table des matières

Notations	13
Introduction	15
1 Problème physique et démarche générale	19
1 Vieillissement des internes de cuve dans les réacteurs à eau sous pression	20
2 Aciers inoxydables austénitiques irradiés	21
2.1 Effets de l'irradiation à l'échelle macroscopique	21
2.2 Effets de l'irradiation à l'échelle microscopique	22
3 Changements d'échelles et choix de modélisation	26
2 Propriétés des monocristaux poreux	28
1 Introduction	29
2 Propriétés locales	29
3 Propriétés effectives	31
4 Plasticité et viscoplasticité des monocristaux poreux	33
5 Conclusion	36
3 Monocristal poreux idéalisé comme un assemblage de Hashin	37
1 Introduction	38
2 Assemblage de Hashin	38
3 Cristaux à symétrie cubique	40
4 Approximations sur les cristaux cubiques	41
5 Chargement hydrostatique	42
6 Surface de jauge	44
7 Conclusion	46
4 Monocristal poreux idéalisé comme un laminé de rang infini	47
1 Introduction	48
2 Laminés de rang infini	48
3 Matériaux incompressibles	49
4 Cristaux à symétrie cubique	51
5 Chargement hydrostatique	52
6 Conclusion	55

5	Monocristal poreux idéalisé comme une microstructure périodique	56
1	Introduction	57
2	Génération de microstructures	57
3	Méthode Fast Fourier Transform	59
4	Réponse locale de la microstructure	60
5	Discrétisation et microstructures	60
6	Conclusion	62
6	Résultats	63
1	Introduction	64
2	Chargement hydrostatique	64
3	Chargement axisymétrique	70
4	Conclusion	76
7	Application aux polycristaux poreux	77
1	Introduction	78
2	Propriétés effectives des polycristaux denses	78
3	Propriétés effectives des polycristaux poreux	78
4	Surface de jauge	80
5	Conclusion	82
8	Application à un acier inoxydable austénitique irradié	83
1	Introduction	84
2	Propriétés locales d'un acier inoxydable austénitique irradié	84
3	Propriétés effectives d'un acier inoxydable austénitique irradié	87
4	Propriétés effectives d'un acier inoxydable austénitique fortement irradié	90
5	Conclusion	92
	Conclusion	93
A	Propriétés des monocristaux poreux cubiques	96
1	Introduction	96
2	Géométrie de quelques cristaux cubiques	96
3	Propriétés locales	97
4	Propriétés d'homogénéité	98
5	Propriétés effectives	99
B	Assemblage de Hashin	101
1	Introduction	101
2	Propriétés locales	101
3	Propriétés effectives	102
4	Critère de plasticité	103

C	Laminés de rang infini	105
1	Introduction	105
2	Matériaux incompressibles	105
3	Cristaux à symétrie cubique	106
4	Chargement hydrostatique	107
D	Méthodes numériques	109
1	Introduction	109
2	Méthodes d'intégration	109
3	Intégration d'un modèle pour monocristaux poreux	113
4	Méthodes d'optimisation	116
E	Aciers inoxydables austénitiques irradiés	118
1	Introduction	118
2	Propriétés locales	118

Notations

Les notations présentées ici sont valables dans l'ensemble du document. Les scalaires sont notés en italique (a par exemple), les vecteurs et les tenseurs d'ordre deux en gras (\mathbf{a} par exemple) et les tenseurs d'ordre quatre en « gras du tableau » (\mathbb{A} par exemple).

Opérateurs

$\delta^{(i,j)}$	vaut 1 si $i = j$, vaut 0 sinon
$\text{sign}(a)$	vaut -1 si $a < 0$, vaut 0 si $a = 0$ et vaut 1 si $a > 0$
$\{a\}$	vaut a si $a \geq 0$, vaut 0 sinon
$\partial_{\mathbf{a}} b$	Dérivée par rapport à \mathbf{a}
$\nabla \mathbf{a}$	Gradient de \mathbf{a}
$\text{div}(\mathbf{a})$	Divergence de \mathbf{a}
\mathbf{a}^T	Transposée de \mathbf{a}
$\text{tr}(\mathbf{a})$	Trace de \mathbf{a}
$ V $	Volume du domaine V
$\langle \mathbf{a} \rangle_V$	Moyenne volumique de \mathbf{a} sur le domaine V telle que $\langle \mathbf{a} \rangle_V = 1/ V \int_V \mathbf{a} \, dV$
$\langle a \rangle$	Moyenne orientationnelle de a sur la sphère unité S telle que $\langle a \rangle = 1/(4\pi) \int_S a \, dS(\boldsymbol{\xi})$
$\ a\ $	Norme 2
\cdot	Produit doublement contracté
\otimes	Produit tensoriel
\otimes_s	Partie symétrique du produit tensoriel telle que $\mathbf{a} \otimes_s \mathbf{b} = 1/2(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} + \mathbf{b} \otimes \mathbf{a})$
\otimes_d	Partie déviatorique du produit tensoriel telle que $\mathbf{a} \otimes_d \mathbf{b} = \mathbf{a} \otimes \mathbf{b} - \text{tr}(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b})/3\mathbf{I}$

Tenseurs

\mathbf{I}	Identité
$\dot{\mathbf{a}}$	Vitesse de \mathbf{a}
$\hat{\mathbf{a}}$	\mathbf{a} dans l'espace de Fourier
\mathcal{T}	Ensemble des tenseurs d'ordre deux symétriques
\mathcal{T}_d	Ensemble des tenseurs d'ordre deux symétriques et déviatoriques
a_m	Partie hydrostatique de \mathbf{a} définie comme $a_m = \text{tr}(\mathbf{a})/3$
\mathbf{a}_d	Partie déviatorique de \mathbf{a} définie comme $\mathbf{a}_d = \mathbf{a} - a_m \mathbf{I}$
a_{eq}	Semi norme équivalente d'un tenseur, si \mathbf{a} est un tenseur de contrainte, alors la contrainte équivalente a_{eq} est égale à $(3/2 \mathbf{a}_d \cdot \mathbf{a}_d)^{1/2}$, si \mathbf{a} est un tenseur de déformation, alors la déformation équivalente a_{eq} est égale à $(2/3 \mathbf{a}_d \cdot \mathbf{a}_d)^{1/2}$

Introduction

Ce travail de thèse s'inscrit dans le cadre de recherches menées à l'Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire (IRSN) concernant le vieillissement des internes de cuve dans les réacteurs nucléaires à eau pressurisée. Les internes, principalement faits d'aciers inoxydables austénitiques, sont des matériaux disposés à l'intérieur de la cuve et remplissent des fonctions essentielles à la sûreté de l'installation. Durant leur utilisation, ils subissent des températures élevées et reçoivent de fortes doses d'irradiation, ce qui modifie leur comportement mécanique. D'autre part, de nombreuses études suggèrent l'apparition potentielle de cavités dans les aciers inoxydables austénitiques fortement irradiés. Ici, l'enjeu est de pouvoir estimer l'effet des cavités sur le comportement mécanique du matériau. Le matériau d'étude est un acier de nuance SA304L fortement irradié à la température de 330 °C. Ce type d'acier inoxydable austénitique est couramment utilisé comme matériau constitutif des internes de cuve.

À l'échelle microscopique, un acier inoxydable austénitique est constitué d'un agrégat de cristaux. Au sein de chaque cristal de la structure polycristalline, des défauts propagent les déformations viscoplastiques. L'irradiation entraîne l'apparition de nouveaux défauts et l'évolution des défauts existants, modifiant ainsi le comportement mécanique du matériau. D'autre part, pour de fortes doses d'irradiation, des cavités peuvent potentiellement apparaître dans les grains du polycristal. De ce fait, un acier inoxydable austénitique fortement irradié peut être représenté comme un polycristal poreux au comportement élasto-viscoplastique. Ce travail de recherche vise à estimer le comportement du matériau pour un état de contraintes relativement élevé lorsque les déformations élastiques sont négligeables devant les déformations d'origine viscoplastique. C'est pourquoi on s'intéresse ici à la viscoplasticité des polycristaux poreux.

Des études expérimentales et numériques sur le comportement viscoplastique des cristaux poreux ont montré que l'anisotropie cristalline a un impact significatif sur la croissance des cavités. Ces observations ont motivé la prise en compte de l'anisotropie cristalline pour modéliser le comportement viscoplastique du matériau poreux (où les cavités sont situées dans les grains). Une démarche en deux étapes, par un double changement d'échelles, est adoptée pour intégrer l'anisotropie cristalline dans un modèle pour polycristaux poreux. De ce fait, la première étape consiste à isoler un grain du polycristal poreux et à en modéliser le comportement viscoplastique. La deuxième étape consiste à incorporer le comportement viscoplastique du monocristal poreux dans la structure polycristalline.

Plusieurs difficultés entrent en compte pour modéliser le comportement viscoplastique d'un monocristal poreux. Premièrement, le milieu d'étude est hétérogène (les cavités sont noyées dans la matrice); deuxièmement, la matrice a un comportement fortement non-linéaire (viscoplasticité); troisièmement, la matrice est anisotrope (matrice cristalline). Plusieurs équipes de recherche ont proposé des estimations pour monocristaux poreux, en plasticité ou en viscoplasticité. Les différences entre les estimations proposées semblent être exacerbées pour certains chargements mécaniques. C'est pourquoi ce travail propose une étude détaillée sur la

viscoplasticité des monocristaux poreux. Trois approches principales ont été explorées pour modéliser le monocristal poreux. Premièrement, le monocristal poreux est idéalisé comme un assemblage d'une infinité de sphères creuses homothétiques ; deuxièmement, le monocristal poreux est idéalisé comme une microstructure laminée séquentiellement, dont le procédé de laminage est réitéré à l'infini ; troisièmement, le monocristal poreux est idéalisé comme une microstructure périodique dont le comportement est évalué par des simulations numériques basées sur un algorithme de transformées de Fourier rapides (FFT pour « Fast Fourier Transforms »).

Les estimations pour monocristaux poreux sont ensuite exploitées via une démarche de double changement d'échelles pour modéliser le comportement viscoplastique d'un polycristal poreux. En vue d'une application à un acier inoxydable austénitique irradié, les paramètres matériau du modèle pour polycristaux poreux sont identifiés à partir de simulations numériques sur des microstructures périodiques où localement le comportement est décrit par une loi cristalline spécialement dédiée à cet acier inoxydable austénitique irradié et prenant en compte l'évolution des défauts dus à l'irradiation.

De manière générale, ce travail cherche à proposer des outils de modélisation innovants, performants, et applicables à une grande variété de configuration cristalline, mais aussi facilement applicables aux aciers inoxydables austénitiques irradiés. Les principaux aboutissements de ces trois années de doctorat ont été synthétisés dans ce manuscrit ordonné de la manière suivante (les détails techniques sont systématiquement reportés en annexe) :

Chapitre 1 - Problème physique et démarche générale

Ce chapitre présente brièvement les internes de cuve dans les réacteurs à eau pressurisée (REP) et les mécanismes de vieillissement qui leurs sont associés. Le chapitre expose certains effets de l'irradiation sur les aciers inoxydables austénitiques aux échelles macroscopique et microscopique, notamment le phénomène de gonflement, et se clôture sur la présentation de la démarche générale de la thèse, basée sur deux changements d'échelles successifs et sur plusieurs choix de modélisation.

Chapitre 2 - Propriétés des monocristaux poreux

L'objectif de ce chapitre est de présenter les définitions et les outils qui seront utiles dans les chapitres suivants pour modéliser le comportement viscoplastique de monocristaux poreux par des méthodes d'homogénéisation. Le chapitre se clôture par une analyse des différents modèles existants, disponibles dans la littérature.

Chapitre 3 - Monocristal poreux idéalisé comme un assemblage de Hashin

Le monocristal poreux est idéalisé comme un assemblage de sphères creuses. Ce chapitre présente au préalable la méthode de [Gurson \(1977\)](#) permettant d'approcher le comportement d'une sphère creuse, faite ici d'un matériau cristallin. Deux démarches s'appuyant sur cette méthode sont ensuite développées. La première démarche exploite la gamme de potentiels présentée dans le chapitre précédent tandis que la deuxième démarche consiste à approcher cette gamme de potentiels par le biais d'inégalités de convexité. L'étude est restreinte aux cristaux viscoplastiques à symétrie cubique. Finalement, une étude approfondie pour le point hydrostatique permet de proposer une estimation dont la construction est très fortement inspirée des travaux de [Paux et al. \(2015\)](#). Les comportements limites linéaire visqueux et parfaitement plastique ainsi que les comportements asymptotiques de cristaux fortement anisotropes sont systématiquement explorés dans le but de confronter l'approche de type Gurson à l'approche des laminés de [Idiart \(2008\)](#) présentée dans le chapitre suivant.

Chapitre 4 - Monocristal poreux idéalisé comme un laminé de rang infini

Le monocristal poreux est maintenant idéalisé comme un laminé de rang infini obéissant à un procédé de laminage isotrope. Ce chapitre expose au préalable la manière de construire et d'employer des microstructures laminées séquentiellement. Une estimation pour un laminé de rang infini à phase inclusionnaire vide est déterminée de manière exacte pour une phase matricielle incompressible. L'étude est ensuite restreinte aux cristaux viscoplastiques à symétrie cubique et aboutit à une estimation à caractère de borne. L'estimation à caractère de borne constitue la principale originalité de ce travail, notamment par la manière dont elle est déterminée. Enfin, une revue détaillée du cas particulier où un laminé de rang infini à matrice cristalline est soumis à un chargement hydrostatique prouve que l'estimation est exacte (dans ce cas précis). Les comportements limites linéaire visqueux et parfaitement plastique ainsi que les comportements asymptotiques de cristaux fortement anisotropes sont systématiquement explorés dans le but de confronter les laminés de rang infini à l'assemblage de sphères creuses.

Chapitre 5 - Monocristal poreux idéalisé comme une microstructure périodique

Le monocristal poreux est ici idéalisé comme un milieu périodique dont le motif élémentaire contient des cavités distribuées aléatoirement. Ce chapitre présente la démarche permettant de générer de telles microstructures. Le chapitre présente ensuite l'algorithme basé sur la transformée de Fourier rapide, permettant de déterminer la réponse macroscopique de ces microstructures, ainsi que la méthode utilisée pour estimer la réponse locale. Enfin, des simulations numériques préliminaires permettent de choisir des cellules unitaires représentatives du monocristal poreux. Les simulations FFT sont considérées dans ce travail comme des résultats de référence.

Chapitre 6 - Résultats

Ce chapitre est dédié à la comparaison des différentes approches développées plus haut. Les estimations obtenues avec la sphère creuse, les laminés et les simulations numériques sont comparées pour les cas d'un chargement purement hydrostatique et d'un chargement axisymétrique quelconque et ce pour plusieurs porosités et différents cristaux cubiques, en viscosité linéaire, en viscoplasticité ou en plasticité. Les estimations sont comparées tant que possible avec les résultats de la littérature.

Chapitre 7 - Application aux polycristaux poreux

Ce chapitre présente deux estimations pour polycristaux poreux en viscoplasticité. Les estimations sont construites à partir des développements concernant les monocristaux poreux menés dans les chapitres précédents. Les estimations pour polycristaux poreux sont ensuite confrontées à des simulations FFT sur des microstructures polycristallines denses où localement le comportement dérive d'une estimation pour monocristaux poreux construite au chapitre 3.

Chapitre 8 - Application à un acier inoxydable austénitique irradié

Ce chapitre présente un modèle cristallin proposé par Han (2012) spécialement dédié à un acier inoxydable austénitique de type SA304L irradié. Le modèle décrit localement le comportement cristallin des aciers irradiés. Il est utilisé afin d'identifier les paramètres matériau des estimations proposées dans le chapitre précédent. Au final, on dispose d'un modèle pour polycristaux poreux reproduisant le comportement viscoplastique d'un acier inoxydable austénitique fortement irradié.

Conférences

- Viscoplasticité des monocristaux poreux sous chargement hydrostatique, Congrès Français de Mécanique, Lille, France (2017)
- Viscoplasticity of voided cubic crystals under hydrostatic loading, International Conference on Computational Plasticity, Barcelone, Espagne (2017)
- Comportement viscoplastique des monocristaux poreux à symétrie cubique (poster), Aussois, France (2018)

Publications

- L. Joessel, P.-G. Vincent, M. Garajeu, M. Idiart, Viscoplasticity of voided cubic crystals under hydrostatic loading, *International Journal of Solids and Structures* 147 (2018) 156–165
- L. Joessel, P.-G. Vincent, M. Garajeu, M. Idiart, Viscoplasticity of voided cubic crystals (en cours de rédaction)

Chapitre 1

Problème physique et démarche générale

Ce chapitre présente brièvement les internes de cuve dans les réacteurs à eau pressurisée et les mécanismes de vieillissement qui leurs sont associés. Le chapitre expose certains effets de l'irradiation sur les aciers inoxydables austénitiques aux échelles macroscopique et microscopique, notamment le phénomène de gonflement, et se clôture sur la présentation de la démarche générale de la thèse, basée sur deux changements d'échelles successifs et sur plusieurs choix de modélisation.

Sommaire

1	 Vieillissement des internes de cuve dans les réacteurs à eau sous pression	20
2	 Aciers inoxydables austénitiques irradiés	21
2.1	Effets de l'irradiation à l'échelle macroscopique	21
2.2	Effets de l'irradiation à l'échelle microscopique	22
3	 Changements d'échelles et choix de modélisation	26

1 Vieillessement des internes de cuve dans les réacteurs à eau sous pression

Les internes de cuve correspondent à l'ensemble des matériels présents à l'intérieur des cuves des réacteurs à eau pressurisée (voir figure 1.1), à l'exception des éléments combustibles, de leurs grappes de commande et des dispositifs d'instrumentation. Ils remplissent des fonctions essentielles comme le support du cœur et son blindage, la canalisation de l'eau de refroidissement dans le cœur, ou encore le guidage mécanique des éléments mobiles. Les internes sont principalement faits d'aciers inoxydables austénitiques de nuances 304 et 304L hypereffortés (« SA » pour « Solution Annealed ») ou de nuances 316 et 316L écrouis à froid (« CW » pour « Cold Worked »), la désignation « L » signifiant « Low carbon » (voir l'étude de [Boiron et Monnier \(1995\)](#) pour une description complète des internes et de leur composition). Les aciers de type 304 sont principalement employés pour la conception des pièces internes massives tandis que les aciers de type 316 sont principalement utilisés pour la conception de la visserie ([Pokor, 2002](#); [Zouari, 2012](#)).

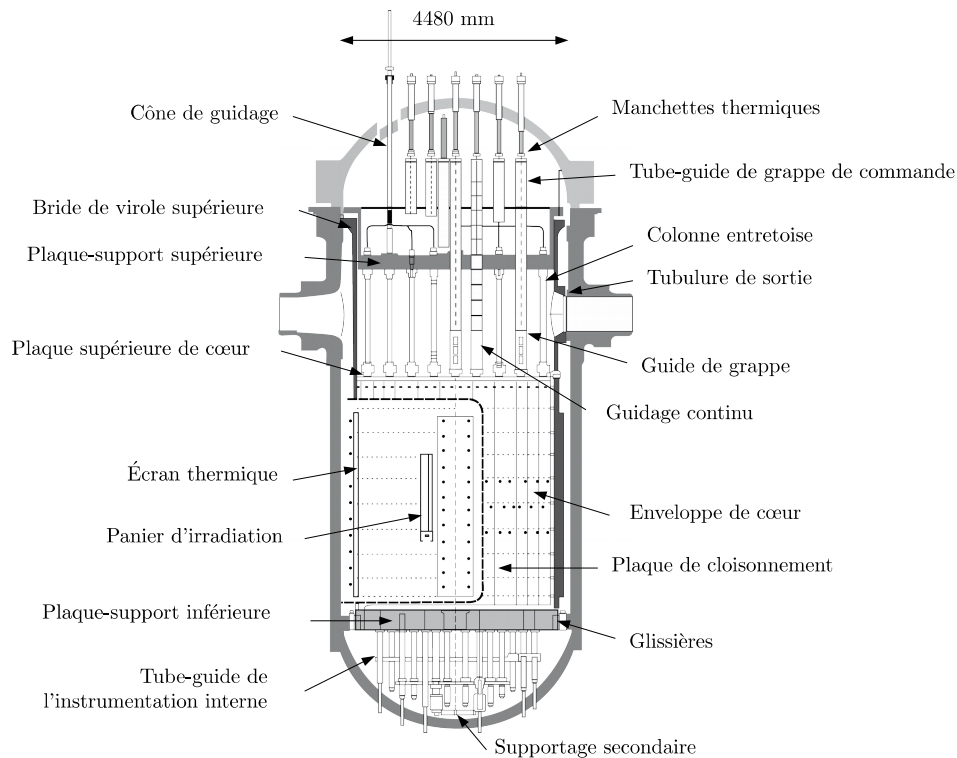


FIGURE 1.1 – Équipements internes de cuve dans un réacteur à eau pressurisée de type 1450 MW. Représentation de S. Joëssel d'après ([Boiron et Monnier, 1995](#)).

Au cours de leur durée d'exploitation, les internes de cuve voient leurs propriétés mécaniques évoluer par vieillissement. Le terme « vieillissement » est relatif à l'ensemble des mécanismes liés au temps qui tendent à faire perdre aux matériels leurs caractéristiques initiales ([Hutin, 2006](#)). Les internes subissent des conditions d'utilisation extrêmes au sein de la cuve. Pour les internes inférieurs, leur température est comprise entre 280 °C et 380 °C ([Han, 2012](#)) et ils reçoivent en 40 ans une dose maximale d'irradiation évaluée à environ 100 dpa (déplacement par atomes) ([Han, 2012](#)). Les mécanismes de vieillissement pouvant affecter les internes de cuve sont, d'après [Ligneau et Lemaire \(2005\)](#) (cité dans l'analyse bibliographique de [Vincent \(2012\)](#)), la fissuration par fatigue, l'usure, la relaxation, la corrosion sous contrainte en milieu primaire et les effets de l'irradiation.

2 Aciers inoxydables austénitiques irradiés

2.1 Effets de l'irradiation à l'échelle macroscopique

À l'état vierge (i.e. non irradié), les aciers inoxydables austénitiques ont un comportement mécanique de type élasto-viscoplastique : ils subissent des déformations irréversibles quand un certain niveau de chargement est atteint. L'irradiation vient altérer leur comportement mécanique. D'après la terminologie de [Ligneau et Lemaire \(2005\)](#), les mécanismes de vieillissement liés à l'irradiation des internes sont la « fragilisation sous irradiation », le « fluage d'irradiation », la « corrosion sous contrainte assistée par l'irradiation » et le « gonflement sous irradiation » de ces aciers.

Durcissement et fragilisation

L'irradiation entraîne un durcissement (augmentation de la limite d'élasticité), une fragilisation (diminution de l'allongement avant rupture) et une diminution de l'écroutissage de ces aciers. À titre illustratif, les courbes liées aux essais de traction réalisés par [Pokor *et al.* \(2004a\)](#) sont reportées sur la figure 1.2. Les mécanismes de durcissement semblent saturer pour une dose inférieure à 10 dpa ([Ligneau et Lemaire, 2005](#); [Garner, 2012](#)). Un essai complémentaire de traction sur un acier irradié à 13 dpa mené par Pokor, présenté dans la thèse de [Han \(2012\)](#) et reporté sur la figure 1.2 confirme cette tendance. Dans la suite de ce travail, il sera supposé que pour une dose de 13 dpa, il y a eu saturation des mécanismes de durcissement dus à l'irradiation.

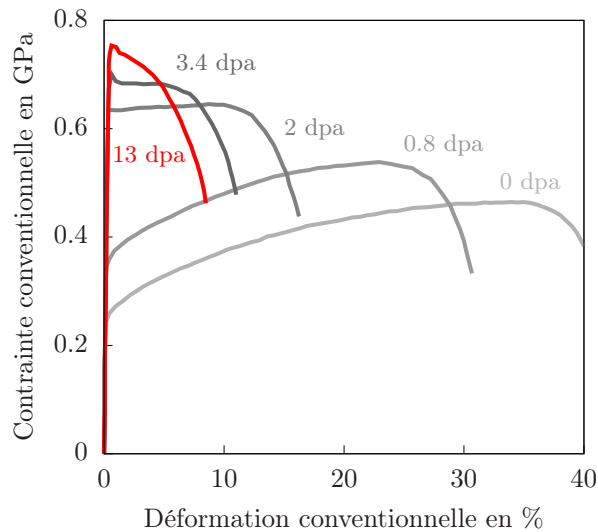


FIGURE 1.2 – Courbes de traction d'aciers 304L hypereutectés vierges ou irradiés à 330 °C dans le réacteur expérimental OSIRIS (France), déformés à la vitesse de $3 \cdot 10^{-4}$ /s à la température de 330 °C ([Han, 2012](#)). La dose d'irradiation est indiquée en dpa.

Gonflement

De nombreuses observations du gonflement d'irradiation (augmentation du volume du matériau sous l'effet de l'irradiation) dans les réacteurs à neutrons rapides ont été rapportées dans la littérature, comme le montre l'étude bibliographique de [Garner \(2012\)](#). Il apparaît que le gonflement d'irradiation est un mécanisme à seuil. Une période d'incubation, au cours de laquelle aucun gonflement ou signe précurseur n'est détectable, est suivie d'un gonflement brutal et rapide du matériau (pouvant être de l'ordre de 1% par dpa). Le gonflement dans les aciers austénitiques dépend de la dose d'irradiation de la façon suivante : jusqu'à une certaine dose critique, le

gonflement augmente très lentement en fonction de la dose. Cet état transitoire est souvent approché par un état de gonflement nul. Au-delà de la dose critique, le taux de gonflement atteint très rapidement une valeur stationnaire (voir figure 1.3).

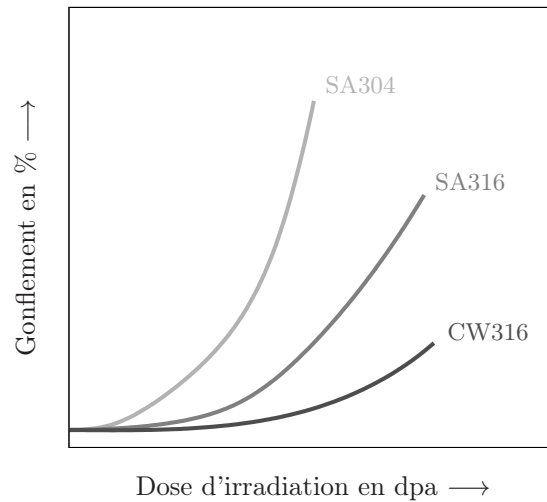


FIGURE 1.3 – Représentation schématique du gonflement en fonction de la dose d'irradiation pour différents aciers inoxydables austénitiques (Garner *et al.*, 2004).

Même si les observations du gonflement d'irradiation dans les réacteurs à neutrons rapides ne sont pas directement transposables au cas des internes des réacteurs à eau pressurisée, l'analyse bibliographique de Garner *et al.* (2004) indique la potentialité d'un gonflement des internes dans les réacteurs à eau pressurisée sur des durées d'exploitation de 40 à 60 ans.

2.2 Effets de l'irradiation à l'échelle microscopique

Les propriétés mécaniques des aciers inoxydables austénitiques sont intimement liées à leur microstructure, qui évolue en fonction de la température, du chargement et de l'irradiation. À l'échelle microscopique, l'acier est perçu comme un agrégat de cristaux d'orientations variées (voir figure 1.4). Dans le polycristal, au sein de chaque grain, des lignes de défauts, les dislocations, propagent des déformations qui sont à l'origine du comportement viscoplastique de l'acier. Les modifications microstructurales dues à l'irradiation sont extrêmement variées, et entraînent notamment le durcissement, la fragilisation et le gonflement des aciers à l'échelle macroscopique.

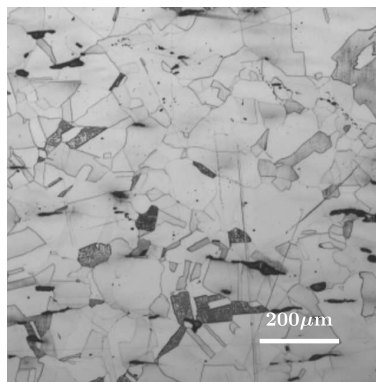


FIGURE 1.4 – Micrographie optique d'un acier austénitique inoxydable 316L. Mise en évidence de sa structure polycristalline (Ming *et al.*, 2016).

Les éléments de synthèse de [Barbu et Massoud \(2008\)](#) et de [Jelea \(2015\)](#) sont repris ici pour expliquer l'effet de l'irradiation à l'échelle atomique. Les interactions entre les particules issues d'une réaction nucléaire et les atomes du matériau modifient sa structure et sa composition. Sous irradiation, la formation de défauts, ponctuels ou étendus, et de bulles de gaz sont les mécanismes qui altèrent le plus les propriétés des aciers des internes. Ces mécanismes sont le produit d'interactions élastiques (pas de modification de l'état interne des atomes, l'énergie cinétique est conservée) et de réactions de transmutation (modification du noyau atomique). Suite à une interaction élastique entre une particule incidente et un atome du réseau de l'acier, toute ou une partie de l'énergie cinétique de la particule est transférée à l'atome. Si l'énergie transférée est supérieure à l'énergie seuil de déplacement caractéristique du matériau, l'atome quitte sa position initiale dans le réseau cristallin et devient un interstitiel, laissant derrière lui une lacune. Si cet atome a encore suffisamment d'énergie, il peut déplacer à son tour d'autres atomes du réseau, produisant d'autres interstitiels et d'autres lacunes. Cette chaîne de déplacements continue jusqu'à ce que l'énergie cinétique des interstitiels créés devienne inférieure à l'énergie seuil de déplacement. Les paires de défauts ponctuels interstitiel/lacune ainsi générées peuvent se recombinaison spontanément si les défauts sont proches. Si les interstitiels et les lacunes sont suffisamment éloignés, les paires peuvent être considérées comme stables. Si la température est suffisamment élevée, les interstitiels et les lacunes peuvent se déplacer par sauts dans le réseau cristallin. La température des internes est suffisamment élevée pour que les interstitiels et les lacunes soient mobiles. Un interstitiel et une lacune n'appartenant pas à la même paire peuvent ainsi se recombinaison. Les lacunes et les interstitiels peuvent aussi être capturés par les dislocations et les joints de grain, ou être piégés sur des impuretés. Les défauts de même type peuvent aussi se rassembler, en formant des amas de lacunes (germination de cavités) et des amas d'interstitiels qui grossissent pour former des boucles de dislocations (boucles de Frank). Les réactions de transmutation ont comme résultat la formation d'hélium et d'hydrogène. L'hélium interagit avec les défauts ponctuels et les amas existants, surtout avec les lacunes et les cavités avec lesquelles il forme des complexes hélium-amas. Les complexes hélium-lacunes constituent des bulles contenant de l'hélium.

À l'échelle du réseau cristallin, l'irradiation entraîne donc l'apparition de boucles de dislocation. Sous irradiation, la température et les contraintes mécaniques font évoluer les dislocations et les boucles de dislocations via divers mécanismes. Ces mécanismes sont interdépendants et entrent en compétition. Toujours à l'échelle du réseau, l'irradiation entraîne aussi l'apparition de cavités.

Évolution des dislocations

De manière générale, à l'état non irradié, un acier hypereffort présente peu de dislocations en comparaison d'un acier écroui à froid : [Pokor *et al.* \(2004b\)](#) indiquent une densité de $10^{10}/\text{m}^2$ pour les SA304L et une densité de $10^{14}/\text{m}^2$ pour les CW316. Pour ces deux nuances d'acier, les expériences indiquées par [Pokor *et al.* \(2004b\)](#) dans le réacteur à neutrons rapides BOR-60 (Russie) à une température de 320°C (proche de celles en conditions REP) montrent une diminution de la densité des dislocations avec la dose d'irradiation jusqu'à une valeur seuil. Les dislocations peuvent être observées au MET (voir figure 1.5).

À température de fonctionnement des internes, et sous chargement mécanique, les dislocations sont mobiles ; elles se déplacent et propagent la plasticité dans le matériau. Plusieurs dislocations peuvent se regrouper en forêt, entravant mutuellement leur mobilité, ce qui conduit à un durcissement du matériau. L'évolution d'une forêt dépend de la compétition entre le fait que de nouvelles dislocations mobiles peuvent être piégées par la forêt et le fait que deux dislocations peuvent s'annihiler entre elles.

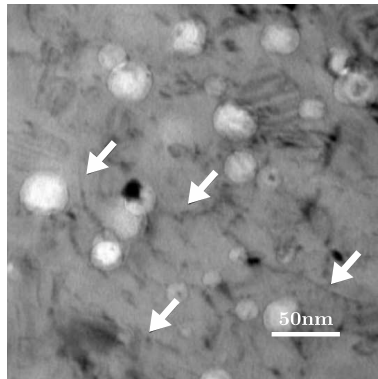


FIGURE 1.5 – Observation de dislocations dans un acier 304L hypertrempé irradié à 36 dpa à 390 ° C dans le réacteur à neutrons rapides PHENIX (France) (Renault *et al.*, 2012).

Apparition de boucles de dislocations

L'irradiation a tendance à créer des boucles de dislocations, appelées aussi boucles de Frank (voir figure 1.6). La densité et la taille des boucles de dislocations évoluent avec la température et la dose d'irradiation (voir l'analyse bibliographique de Han (2012)). Les boucles de Frank peuvent s'observer pour une dose d'irradiation inférieure à 1 dpa (voir les observations de Pokor *et al.* (2004b) sur un acier SA304L irradié à 0.8 dpa à la température de 330 ° C dans le réacteur OSIRIS). D'après l'analyse bibliographique de Han (2012), leur densité et leur taille augmentent avec la dose, et une tendance à saturation est observée pour une dose avoisinant 5 à 10 dpa (observations de Bruemmer *et al.* (1999) sur des aciers 304 et 316 irradiés dans un réacteur à eau légère).

À température de fonctionnement des internes, et sous chargement mécanique, les boucles de dislocations sont des obstacles aux dislocations mobiles et entraînent un durcissement du matériau (mécanisme classiquement admis (Han, 2012)). À contrario, les boucles de dislocations peuvent aussi être balayées par les dislocations mobiles. Ce mécanisme conduit à un rétablissement local de la microstructure et à une localisation des déformations plastiques, jouant ainsi un rôle prédominant dans la fragilisation du matériau irradié.

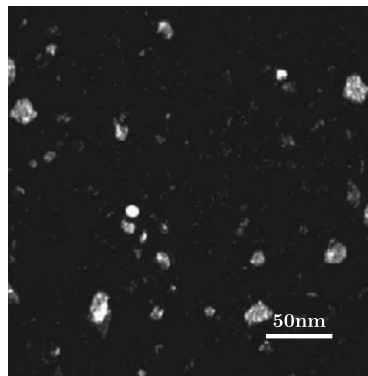


FIGURE 1.6 – Observation de boucles de dislocations dans un acier CW316 d'interne irradié à 33 dpa en REP à la température de 290 ° C (Edwards *et al.*, 2009).

Apparition et évolution des cavités

L'apparition de cavités, responsable du gonflement à l'échelle macroscopique, dépend de plusieurs paramètres comme le type de matériau (composition chimique, traitements thermomécaniques), la température, la dose d'irradiation, le spectre d'irradiation, le taux de dose d'irradiation (Garner *et al.*, 2004). La présence d'hélium aide à leur nucléation et leur stabilisation : d'après Han (2012), les atomes d'hélium jouent un rôle important comme catalyseur pour le regroupement des lacunes qui migrent par diffusion dans le matériau, ce

qui est considéré comme une source de germination de cavités. Les cavités dites « vides » croissent par absorption de lacunes. Dans un premier temps, elles participent au durcissement du matériau, puis, lorsqu'elles sont suffisamment nombreuses et de taille suffisamment importante, elles ont pour effet de détériorer les propriétés élastiques du matériau (diminution des modules élastiques), accompagné d'une perte de résistance et d'une fragilisation (Garner, 2012).

Principalement étudiée dans des réacteurs à neutrons rapides, l'apparition de cavités a aussi été observée dans des aciers irradiés dans les réacteurs à eau pressurisée (voir figure 1.7.a), notamment sur des vis faites d'acier CW316. L'acier CW316 est connu pour être moins enclin au gonflement que l'acier SA304 (Garner *et al.*, 2004). Les populations de cavités observées dans les réacteurs à eau pressurisée apparaissent préférentiellement distribuées de manière uniforme, à l'intérieur des grains du polycristal (cavités intragranulaires). De nombreuses observations de cavités ont été effectuées sur des aciers inoxydables irradiés dans des réacteurs à neutrons rapides (voir figures 1.7 et 1.8). Dans le réacteur BOR-60, des niveaux de gonflement importants ont été mesurés sur un acier inoxydable austénitique russe (gonflement estimé jusqu'à 30% environ par mesure de densité (Neustroev et Garner, 2008)).

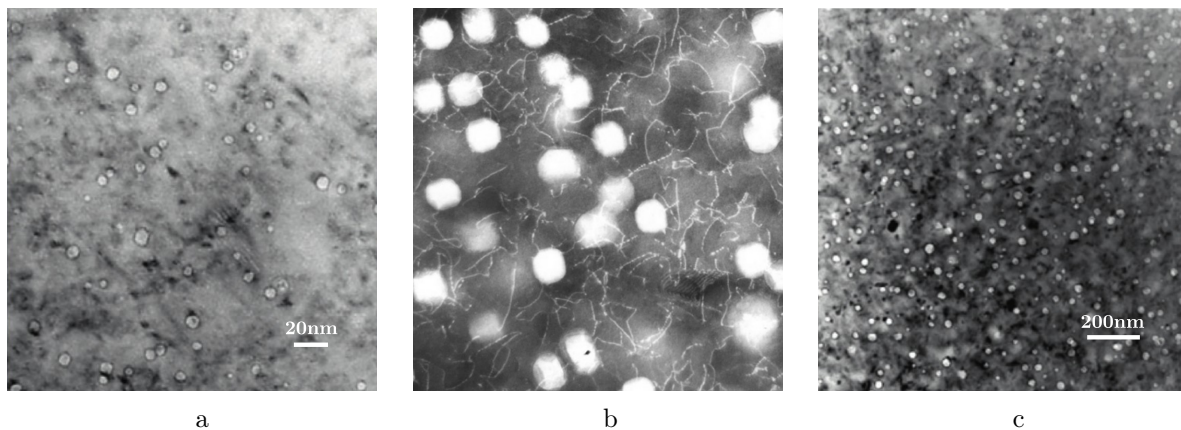


FIGURE 1.7 – Observation de cavités dans des aciers inoxydables irradiés. a : cavités dans un acier CW316 irradié à 12 dpa à 345 ° C (Edwards *et al.*, 2003). L'acier provient d'une vis d'une plaque de cloisonnement dans la centrale REP de Tihange (Belgique). b : Image à contraste inversé montrant des cavités et des lignes de dislocation dans un alliage Fe-10Cr-30Mn irradié à 15 dpa à 520 ° C dans le réacteur d'essai FFTF (États-Unis). La taille caractéristique des cavités est de 40 nm (Brager *et al.*, 1985). c : Cavités observées dans un acier 304 irradié à 10 dpa à 379 ° C dans le réacteur expérimental EBR-II (États-Unis) (Bond *et al.*, 1999).

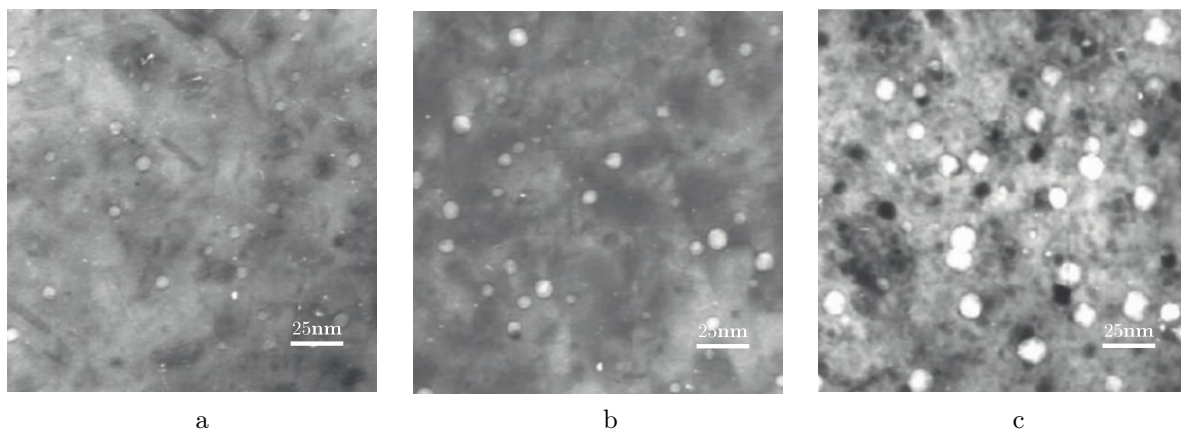


FIGURE 1.8 – Observation de cavités dans un acier 12X18H9 irradié pendant 27 ans à 320-330 ° C dans le réacteur BOR-60 (Russie) (Garner *et al.*, 2006). a : Échantillon irradié à 3 dpa. b : Échantillon irradié à 6.5 dpa. c : Échantillon irradié à 22 dpa.

3 Changements d'échelles et choix de modélisation

L'objectif de ce travail est de proposer un modèle pour décrire le comportement viscoplastique des aciers inoxydables austénitiques irradiés en prenant en compte des cavités intragranulaires correspondant à de forts niveaux d'irradiation. Ici, un « fort niveau d'irradiation » correspond à une dose supérieure à 13 dpa, lorsqu'on peut supposer qu'il y a eu saturation des mécanismes de durcissement dus à l'irradiation et qu'il y a potentiellement la présence de larges cavités intragranulaires. L'évolution des cavités (changement de forme, de porosité) avec le chargement mécanique n'est pas étudiée dans ce travail. Ainsi, on recherche un modèle pour décrire le comportement viscoplastique d'un polycristal poreux (avec cavités intragranulaires). Dans le but d'obtenir un modèle le plus analytique possible et donc facilement intégrable dans un code de calcul de structures, plusieurs hypothèses sont faites sur le comportement local des grains entourant les cavités : on considère une simple loi puissance avec cission de référence fixe (pas d'écrouissage) et similaire pour tous les systèmes de glissement. Les cavités sont supposées de forme sphérique et distribuées de manière homogène dans les grains. De plus, d'autres hypothèses simplificatrices sont faites sur la géométrie : le polycristal est supposé globalement isotrope (pas de forme particulière des grains, orientation aléatoire des grains). La modélisation du problème est représentée sur la figure 1.9.

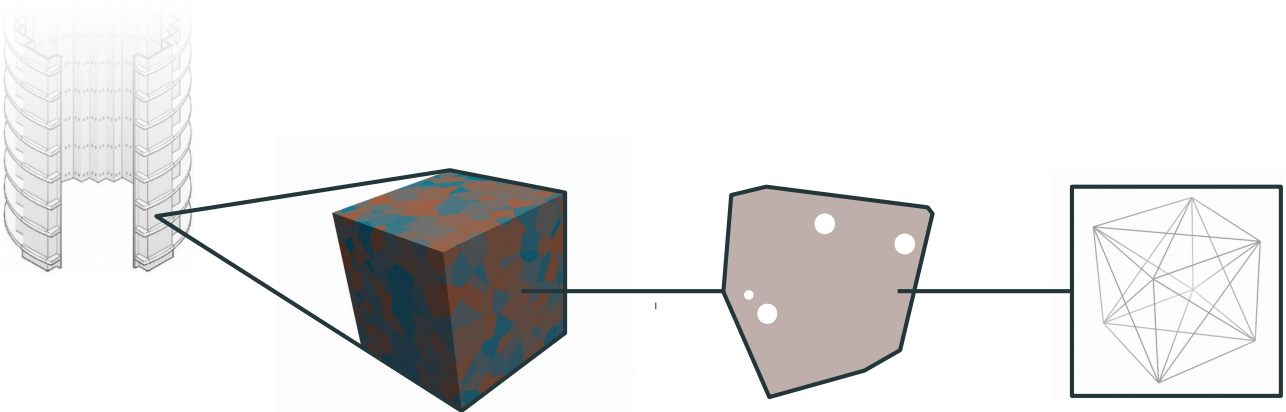


FIGURE 1.9 – Représentation schématique de la modélisation du problème physique à différentes échelles. De gauche à droite : acier inoxydable austénitique fortement irradié, structure polycristalline (les grains sont répartis et orientés de manière aléatoire), monocristal poreux (les cavités sont réparties de manière aléatoire) et structure cristalline (agencement du réseau atomique de type cubique à faces centrées).

La taille caractéristique des cavités étant bien plus petite que la taille caractéristique des grains du polycristal (voir les échelles des figures 1.4 et 1.7), la modélisation du comportement du polycristal poreux est articulée en deux étapes. Dans une première étape, on recherche le comportement viscoplastique d'un monocristal poreux où les cavités sphériques sont distribuées de manière uniforme. La structure cristalline des aciers d'étude étant de type cubique à faces centrées (Han, 2012), on s'intéresse ici à la modélisation de matériaux cristallins à symétrie cubique. Le modèle obtenu, basé sur deux approches différentes (voir chapitres 3 et 4), est validé par comparaison avec des simulations numériques en champs complets par la méthode FFT basée sur les transformées de Fourier rapides (voir chapitre 5). La deuxième étape consiste à dériver un modèle pour un polycristal où les grains sont distribués de manière aléatoire et suivent le modèle de comportement viscoplastique pour monocristal poreux mis au point à la première étape. La démarche de double changement d'échelles est illustrée sur la figure

1.10. Les paramètres du modèle sont identifiés pour l'acier SA304L irradié en utilisant des résultats d'essais de traction existants et des simulations numériques FFT avec la loi cristalline de Han (2012) qui prend en compte l'évolution des dislocations et des boucles de dislocations dues à l'irradiation avec le chargement (voir chapitre 8). Dans le modèle final, l'effet des dislocations et des boucles de dislocations est pris en compte par l'ajustement d'un unique paramètre matériau.

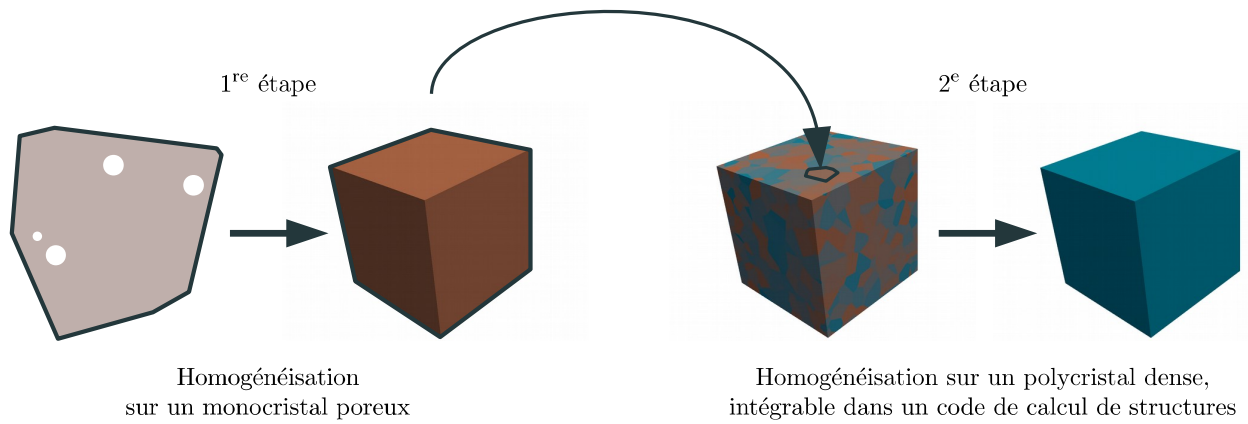


FIGURE 1.10 – Représentation schématique de la démarche de double changement d'échelles. La première étape consiste à modéliser le comportement effectif d'un monocristal poreux. La deuxième étape consiste à modéliser le comportement effectif d'un polycristal où chaque grain se comporte comme un monocristal poreux homogénéisé.

Chapitre 2

Propriétés des monocristaux poreux

L'objectif de ce chapitre est de présenter les définitions et les outils qui seront utiles dans les chapitres suivants pour modéliser le comportement viscoplastique de monocristaux poreux par des méthodes d'homogénéisation. Le chapitre se clôture par une analyse des différents modèles existants, disponibles dans la littérature.

Sommaire

1	Introduction	29
2	Propriétés locales	29
3	Propriétés effectives	31
4	Plasticité et viscoplasticité des monocristaux poreux	33
5	Conclusion	36

1 Introduction

Le monocristal poreux est représenté comme un matériau hétérogène constitué de deux phases homogènes : une matrice dans laquelle baignent des inclusions. La matrice cristalline est repérée par la phase 1 et les inclusions vides sont collectivement représentées par la phase 2. Le volume élémentaire représentatif du monocristal poreux contient une distribution statistiquement uniforme de cavités dont la taille caractéristique est bien plus petite que celle du cristal environnant. Le comportement de la matrice cristalline est purement viscoplastique. L'élasticité et l'écroutissement du cristal étant négligés, la réponse du matériau est purement dissipative et peut de ce fait être décrite par un seul potentiel avec une description eulérienne des déplacements.

2 Propriétés locales

Le volume élémentaire représentatif du monocristal poreux occupe le domaine Ω de frontière $\partial\Omega$. Les deux phases $r = 1, 2$ du monocristal poreux occupent chacune les sous domaines $\Omega^{(r)}$ disjoints, et chacune est repérée par une fonction indicatrice $\chi^{(r)}$ valant 1 si le vecteur position \mathbf{x} est dans la phase r et 0 sinon. Le comportement du cristal est sensible aux vitesses de déformation. C'est pourquoi les relations présentées par la suite dépendront (ou susciteront) non pas des déformations mais des taux de déformation. Le comportement de chaque phase est caractérisé par une fonction $w^{(r)}$ de sorte que le tenseur des contraintes de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ et le tenseur des taux de déformation eulérienne \mathbf{D} soient reliés par

$$\boldsymbol{\sigma} = \partial_{\mathbf{D}} w(\mathbf{D}, \mathbf{x}) \quad (2.1)$$

où

$$w(\mathbf{D}, \mathbf{x}) = \sum_{r=1}^2 \chi^{(r)}(\mathbf{x}) w^{(r)}(\mathbf{D}). \quad (2.2)$$

et où la fonction $w^{(r)}$ est convexe, positive, nulle lorsque \mathbf{D} est nul et enfin thermodynamiquement consistante (dissipation positive). La notation $\partial_{\mathbf{D}}$ correspond à la dérivée partielle par rapport à \mathbf{D} . Pour chaque phase, le potentiel de dissipation $w^{(r)}$ est relié au potentiel en contrainte $u^{(r)}$ par la transformation de Legendre-Fenchel

$$w^{(r)}(\mathbf{D}) = \sup_{\boldsymbol{\sigma}} \left\{ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D} - u^{(r)}(\boldsymbol{\sigma}) \right\}. \quad (2.3)$$

Alternativement, le comportement de chaque phase est caractérisé par la fonction convexe complémentaire $u^{(r)}$ de sorte que les contraintes et les taux de déformation soient reliés par

$$\mathbf{D} = \partial_{\boldsymbol{\sigma}} u(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x}) \quad (2.4)$$

où

$$u(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x}) = \sum_{r=1}^2 \chi^{(r)}(\mathbf{x}) u^{(r)}(\boldsymbol{\sigma}). \quad (2.5)$$

et où

$$u^{(r)}(\boldsymbol{\sigma}) = \sup_{\mathbf{D}} \left\{ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D} - w^{(r)}(\mathbf{D}) \right\}. \quad (2.6)$$

Le comportement de la phase vide est caractérisé par le potentiel de dissipation $w^{(2)}(\mathbf{D}) = 0$. Dans les cavités, les contraintes sont donc nulles pour tout taux de déformation donné. Alternativement, le comportement

de la phase vide peut être caractérisé par le potentiel en contrainte $u^{(2)}(\boldsymbol{\sigma}) = 0$ si $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}$ et $u^{(2)}(\boldsymbol{\sigma}) \rightarrow +\infty$ sinon. Désormais, le comportement de la matrice cristalline est défini par le potentiel $w^{(1)}$ noté w par simplicité, alternativement $u^{(1)}$ noté u .

Viscoplasticité

Dans le cristal, les déformations inélastiques résultent d'un comportement dissipatif (irréversible) et la viscosité des mécanismes responsables de ces déformations est non négligeable. Le glissement des plans atomiques est la source de ces déformations. Il se produit sur les plans les plus denses et suit les directions les plus denses. Au total, le cristal se déforme plastiquement selon K systèmes de glissement chacun repéré par un vecteur $\mathbf{n}^{(k)}$ normal à un plan de glissement et par une direction de glissement $\mathbf{m}^{(k)}$. Le tenseur de Schmid

$$\boldsymbol{\mu}^{(k)} = \mathbf{n}^{(k)} \otimes_s \mathbf{m}^{(k)} \quad (2.7)$$

permet de projeter le tenseur des contraintes sur le système de glissement k et de modéliser la direction de l'écoulement plastique. Pour rappel, la notation \otimes_s correspond à la partie symétrique du produit tensoriel. Les mécanismes de glissement (et leur viscosité) sont intégrés dans le comportement du cristal, décrit par le potentiel en contrainte de type loi puissance

$$u(\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{k=1}^K \frac{\tau_0^{(k)} \dot{\gamma}_0}{n+1} \left| \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \right|^{n+1}. \quad (2.8)$$

La viscosité de ces mécanismes est traduite par l'exposant $n \geq 1$ et par le taux de glissement de référence $\dot{\gamma}_0$ qui sera fixé à 1 dans cette étude. Conformément à la dernière expression, le glissement le long d'un système k devient significatif lorsque la cission $\tau^{(k)} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}$ atteint la cission de référence $\tau_0^{(k)} > 0$. Le potentiel en contrainte de type loi puissance se prête mieux à certaines applications sous la forme

$$u(\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{k=1}^K \frac{\tau_0^{(k)} \dot{\gamma}_0}{n+1} \left(\frac{\boldsymbol{\sigma}}{\tau_0^{(k)}} \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)} \otimes \boldsymbol{\mu}^{(k)} \cdot \frac{\boldsymbol{\sigma}}{\tau_0^{(k)}} \right)^{(n+1)/2}. \quad (2.9)$$

Par ailleurs, il est positivement homogène de degré $n+1$ en $\boldsymbol{\sigma}$. Plus formellement, on peut écrire $u(\lambda\boldsymbol{\sigma}) = |\lambda|^{n+1}u(\boldsymbol{\sigma})$ pour tout $\lambda \in \mathbb{R}$. Il est aussi homogène de degré 1 en $\dot{\gamma}_0$. Plus formellement, on peut écrire $u(\boldsymbol{\sigma}, \lambda\dot{\gamma}_0) = \lambda u(\boldsymbol{\sigma}, \dot{\gamma}_0)$ pour tout $\lambda \in \mathbb{R}$. Par conséquent, le potentiel de dissipation w dual au potentiel u est positivement homogène de degré $1/n+1$ en \mathbf{D} et est homogène de degré $-1/n$ en $\dot{\gamma}_0$ (voir annexe A section 4).

Désormais, l'attention est restreinte aux familles de systèmes de glissement à géométrie cubique. Par exemple les cristaux cubiques à faces centrées sont définis par une famille de systèmes de glissement à symétrie cubique, les cristaux cubiques centrés par deux et certains cristaux ioniques par trois (voir chapitre 6 section 1 pour plus de détails). Au sein de chaque famille, les cissions de référence $\tau_0^{(k)}$ sont maintenant considérées comme égales, afin de garantir une réponse à symétrie cubique du cristal. Ici, par simplicité, les cristaux dits « faiblement anisotrope » sont des cristaux où les cissions de référence sont égales sur tous les systèmes de glissement ($\tau_0^{(k)} = \tau_0 \forall k$) et les cristaux dits « fortement anisotrope » sont des cristaux où les cissions de référence varient d'une famille à l'autre ($\tau_0^{(k)} = \tau_0^A \forall k \in A$, avec A une famille de systèmes de glissement). On note que les tenseurs de Schmid sont de trace nulle et que par conséquent, le potentiel en contrainte caractérise une réponse incompressible.

Le potentiel en contrainte de type loi puissance est particulièrement bien approprié pour étudier l'effet de non linéarité et l'anisotropie des cristaux et ce pour une large gamme de comportements. Les cas limites $n = 1$

et $n \rightarrow \infty$ correspondent respectivement à la viscosité linéaire et à la plasticité parfaite.

Viscosité linéaire

Dans le cas linéaire où $n = 1$, le potentiel en contrainte prend la forme

$$u(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\dot{\gamma}_0}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbb{M} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.10)$$

où le tenseur $\mathbb{M} = \sum_{k=1}^K 1/\tau_0^{(k)} \boldsymbol{\mu}^{(k)} \otimes \boldsymbol{\mu}^{(k)}$ est incompressible. Les contraintes sont alors reliées aux taux de déformation par la relation linéaire $\mathbf{D} = \dot{\gamma}_0 \mathbb{M} \cdot \boldsymbol{\sigma}$. Alternativement, le potentiel de dissipation, évalué par la transformée de Legendre (2.3), prend la forme (voir annexe A section 3)

$$w(\mathbf{D}) = \begin{cases} \frac{1}{2\dot{\gamma}_0} \mathbf{D} \cdot \mathbb{L} \cdot \mathbf{D} & \text{si } \text{tr} \mathbf{D} = 0, \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.11)$$

où le tenseur \mathbb{L} est le pseudo inverse du tenseur \mathbb{M} tel que $\mathbb{M} \cdot \mathbb{L} \cdot \mathbb{M} = \mathbb{M}$. Les contraintes sont alors reliées aux taux de déformation par la relation linéaire $\boldsymbol{\sigma} = 1/\dot{\gamma}_0 \mathbb{L} \cdot \mathbf{D}$. Pour des cristaux cubiques (symétrie cubique) faiblement anisotropes (cissions de référence égales sur tous les systèmes de glissement telles que $\tau_0^{(k)} = \tau_0 \forall k$), le tenseur \mathbb{M} a une symétrie cubique et prend la forme $\mathbb{M} = \alpha \mathbb{K}_a + \beta \mathbb{K}_b$ où \mathbb{K}_a et \mathbb{K}_b sont des projecteurs sur des sous-espaces des tenseurs déviatoriques et où les coefficients α et β dépendent des propriétés du cristal via $\tau_0^{(k)}$ et $\boldsymbol{\mu}^{(k)}$ (l'annexe A section 3 détaille la procédure pour déterminer ces coefficients). Le tenseur \mathbb{L} prend la forme $\mathbb{L} = 1/\alpha \mathbb{K}_a + 1/\beta \mathbb{K}_b$.

Plasticité

Dans le cas parfaitement plastique où $n \rightarrow \infty$, le potentiel en contrainte devient la fonction indicatrice de l'ensemble convexe

$$\mathcal{P} = \left\{ \boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{T}_d : |\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}| \leq \tau_0^{(k)}, k = 1, \dots, K \right\} \quad (2.12)$$

qui représente le domaine de résistance de la matrice cristalline. La frontière de ce domaine de résistance est la surface de plasticité. Le potentiel de dissipation, évalué par la transformée de Legendre (2.3), est la fonction d'appui du convexe \mathcal{P} telle que

$$w(\mathbf{D}) = \begin{cases} \sup_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{P}} \boldsymbol{\sigma}_d \cdot \mathbf{D}_d & \text{si } \text{tr} \mathbf{D} = 0, \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.13)$$

Pour les cristaux, elle est un polyèdre dans l'espace des contraintes déviatoriques et de ce fait le supremum dans l'expression précédente doit être atteint à un sommet du polyèdre tel que

$$w(\mathbf{D}) = \begin{cases} \max_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{V}} \boldsymbol{\sigma}_d \cdot \mathbf{D}_d & \text{si } \text{tr} \mathbf{D} = 0, \\ +\infty & \text{sinon,} \end{cases} \quad (2.14)$$

où \mathcal{V} est l'ensemble des sommets du polyèdre représentant le domaine de résistance.

3 Propriétés effectives

La réponse macroscopique (ou effective) du biphasé est définie par la relation entre la moyenne des contraintes $\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_\Omega$ et la moyenne des taux de déformations $\bar{\mathbf{D}} = \langle \mathbf{D} \rangle_\Omega$ sur le volume élémentaire représentatif. Le

potentiel effectif de dissipation \tilde{w} est défini par un principe de minimum d'énergie dissipée (voir par exemple Willis (1989)) comme

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}) = \min_{\mathbf{D} \in \mathcal{K}(\bar{\mathbf{D}})} \langle w(\mathbf{D}, \mathbf{x}) \rangle_{\Omega} = \min_{\mathbf{D} \in \mathcal{K}(\bar{\mathbf{D}})} \sum_{r=1}^2 c^{(r)} \langle w^{(r)}(\mathbf{D}) \rangle_{\Omega^{(r)}} \quad (2.15)$$

où $c^{(r)} = \langle \chi^{(r)}(\mathbf{x}) \rangle_{\Omega}$ est la fraction volumique de la phase r . L'ensemble $\mathcal{K}(\bar{\mathbf{D}})$ des taux de déformations cinématiquement admissibles est défini par

$$\mathcal{K}(\bar{\mathbf{D}}) = \{ \mathbf{D} \in \mathcal{T} : \mathbf{D}(\mathbf{x}) = \nabla \otimes_s \mathbf{u}(\mathbf{x}) \text{ dans } \Omega \wedge \mathbf{u} = \bar{\mathbf{D}}\mathbf{x} \text{ sur } \partial\Omega \} \quad (2.16)$$

où \mathbf{u} est le champ de vitesses et $\bar{\mathbf{D}}$ est un tenseur constant symétrique de deuxième ordre. Le potentiel \tilde{w} correspond à l'énergie dissipée lorsque le matériau hétérogène est soumis à un taux de déformation effectif $\bar{\mathbf{D}}$ donné, et caractérise complètement le comportement du milieu étudié. Le comportement dans les cavités étant caractérisé par un potentiel de dissipation nul, le potentiel effectif d'un milieu poreux découle de l'expression (2.15) et s'écrit

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}) = (1 - f) \min_{\mathbf{D} \in \mathcal{K}(\bar{\mathbf{D}})} \langle w(\mathbf{D}) \rangle_{\Omega^{(1)}} \quad (2.17)$$

où f est la fraction volumique occupée par la phase vide (la porosité). Les contraintes effectives sont reliées aux taux de déformation effectifs par

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \partial_{\bar{\mathbf{D}}} \tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}). \quad (2.18)$$

Le comportement effectif du milieu poreux peut aussi être caractérisé par un potentiel effectif en contrainte issu d'un procédé analogue à (2.17) tel que

$$\tilde{u}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}) = (1 - f) \min_{\boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{S}(\bar{\boldsymbol{\sigma}})} \langle u(\boldsymbol{\sigma}) \rangle_{\Omega^{(1)}} \quad (2.19)$$

où

$$\mathcal{S}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}) = \left\{ \boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{T} : \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0} \text{ dans } \Omega^{(1)} \wedge \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} = \mathbf{0} \text{ sur } \partial\Omega^{(2)} \wedge \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \bar{\boldsymbol{\sigma}} \right\} \quad (2.20)$$

avec \mathbf{n} le vecteur unitaire normal à la frontière du domaine $\partial\Omega^{(2)}$. En plasticité, comme rencontré dans Bouchitte et Suquet (1991), le potentiel \tilde{u} devient la fonction indicatrice du domaine de résistance macroscopique

$$\mathcal{P}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}) = \{ \boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{T} : \boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{S}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}) \wedge \boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{P} \}. \quad (2.21)$$

Les contraintes effectives sont reliées aux taux de déformation effectifs par

$$\bar{\mathbf{D}} = \partial_{\bar{\boldsymbol{\sigma}}} \tilde{u}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}). \quad (2.22)$$

Toujours dans le cadre de la viscoplasticité de type loi puissance, étant donné la géométrie du volume élémentaire représentatif (matrice à symétrie cubique et dispersion statistiquement uniforme des cavités), les potentiels effectifs (2.17) et (2.19) prennent une forme spécifique pour le cas particulier d'un chargement purement hydrostatique (chargement sphérique, dilatation/compression pure).

Cas particulier d'un chargement purement hydrostatique

La distribution des vides étant choisie comme isotrope, l'anisotropie globale du matériau n'est due qu'à l'anisotropie de la matrice et donc le potentiel effectif \tilde{w} hérite de la symétrie cubique du potentiel local w . Un

taux de déformation sphérique $\bar{\mathbf{D}} = \bar{D}_m \mathbf{I}$ provoque alors une contrainte hydrostatique $\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \bar{\sigma}_m \mathbf{I}$, comme le justifie l'annexe A section 5, et la relation (2.18) se réduit à

$$\bar{\sigma}_m \mathbf{I} = \partial_{\bar{\mathbf{D}}} \tilde{w}(\bar{D}_m \mathbf{I}) = \frac{1}{3} \partial_{\bar{D}_m} \tilde{w}(\bar{D}_m \mathbf{I}) \mathbf{I} \quad (2.23)$$

ou même à

$$\bar{\sigma}_m = \frac{1}{3} \partial_{\bar{D}_m} \tilde{w}_h(\bar{D}_m) \quad (2.24)$$

où la fonction $\tilde{w}_h(\bar{D}_m)$ est équivalente à $\tilde{w}(\bar{D}_m \mathbf{I})$. Dans le cadre de la viscoplasticité de type loi puissance, le potentiel effectif \tilde{w}_h hérite de w des propriétés d'homogénéité de degré $1 + 1/n$ en $\bar{\mathbf{D}}$ et de degré $-1/n$ en $\dot{\gamma}_0$. De ce fait, le potentiel effectif \tilde{w}_h prend la forme

$$\tilde{w}_h(\bar{D}_m) = \frac{\dot{\gamma}_0 \tilde{\sigma}_h}{1 + 1/n} \left| \frac{3\bar{D}_m}{\dot{\gamma}_0} \right|^{1+1/n}, \quad (2.25)$$

où $\tilde{\sigma}_h$ est la contrainte d'écoulement hydrostatique et dépend de l'exposant n , de la porosité f , des cissons de référence $\tau_0^{(k)}$ et des tenseurs de Schmid $\boldsymbol{\mu}^{(k)}$, mais pas des taux \bar{D}_m et $\dot{\gamma}_0$. La contrainte d'écoulement hydrostatique $\tilde{\sigma}_h$ caractérise complètement la réponse d'un monocristal poreux sous chargement hydrostatique.

Pour des raisons analogues, le potentiel effectif en contrainte \tilde{u} pour un chargement hydrostatique hérite de u des propriétés d'homogénéité de degré $n + 1$ en $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ (voir annexe 3 section 5) et de degré 1 en $\dot{\gamma}_0$ et prend la forme

$$\tilde{u}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}_m) = \frac{\dot{\gamma}_0 \tilde{\sigma}_h}{1 + n} \left| \frac{\bar{\sigma}_m}{\tilde{\sigma}_h} \right|^{1+n} \quad (2.26)$$

où la contrainte d'écoulement hydrostatique $\tilde{\sigma}_h$ est équivalente à celle de l'expression (2.25), comme le justifie l'annexe A section 5.

Surface de jauge

Pour un matériau viscoplastique de type loi puissance, les propriétés d'homogénéités de \tilde{u} , héritées des propriétés d'homogénéité de u , permettent d'écrire

$$\tilde{u}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}) = \frac{\tau_0 \dot{\gamma}_0}{n + 1} \left| \frac{\lambda(\bar{\boldsymbol{\sigma}})}{\tau_0} \right|^{n+1} \quad (2.27)$$

où τ_0 est une contrainte de référence et où la fonction λ est homogène de degré 1 en $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ et dépend aussi bien des paramètres cristallins que microstructuraux. Le tenseur des contraintes normalisé $\boldsymbol{\Sigma} = \bar{\boldsymbol{\sigma}}/\lambda(\bar{\boldsymbol{\sigma}})$ permet de définir la surface de jauge d'un matériau cristallin viscoplastique comme

$$\mathcal{S}(\boldsymbol{\Sigma}) = \left\{ \boldsymbol{\Sigma} \in \mathcal{T} : \tilde{u}(\boldsymbol{\Sigma}) = \frac{\dot{\gamma}_0 \tau_0^{-n}}{n + 1} \right\}, \quad (2.28)$$

où $\mathcal{S}(\boldsymbol{\Sigma})$ généralise la notion de surface de résistance en plasticité à la viscoplasticité (Leblond *et al.*, 1994). On note qu'en plasticité, la fonction λ indique le seuil de plasticité défini ici par τ_0 (Leblond *et al.*, 1994).

4 Plasticité et viscoplasticité des monocristaux poreux

Des études expérimentales et numériques sur la viscoplasticité de monocristaux poreux ont montré que l'anisotropie cristalline peut avoir un impact significatif sur les mécanismes de croissance des cavités (voir par exemple Crépin *et al.* (1996), Yerra *et al.* (2010), Srivastava et Needleman (2013)). Ces études ont récemment

motivées des efforts de recherche, principalement menés par [Han et al. \(2013\)](#), [Paux et al. \(2015\)](#), [Mbiakop et al. \(2015\)](#) et [Song et Ponte Castañeda \(2017a\)](#), pour incorporer l'anisotropie cristalline dans des modèles constitutifs pour matériaux poreux, qui étaient originellement développés sous l'hypothèse d'une isotropie locale. Dans les études de [Han et al. \(2013\)](#), [Paux et al. \(2015\)](#), [Mbiakop et al. \(2015\)](#) et [Song et Ponte Castañeda \(2017a\)](#), une attention particulière est portée au cas du chargement purement hydrostatique : ce cas de chargement exacerbe (en général) les différences entre les approches et permet (en général) un traitement analytique particulier. Les quatre études sont développées à partir des principes (2.17) et (2.19) présentés dans la section précédente.

Monocristaux poreux au comportement plastique par [Han et al. \(2013\)](#)

L'étude pionnière de [Han et al. \(2013\)](#) sur la plasticité des monocristaux poreux propose un critère de résistance à partir d'une approche variationnelle basée sur un composite linéaire de comparaison expliquée par [Ponte Castañeda et Suquet \(1998\)](#), originellement proposée par [Ponte Castañeda \(1991\)](#) et équivalente à la méthode sécante modifiée de [Suquet \(1995\)](#). Dans le cas d'un chargement hydrostatique, cette approche est moins performante qu'une approche de type [Gurson \(1977\)](#), du moins pour des matériaux poreux non-linéaires localement isotropes. C'est pourquoi Han et coauteurs étendent leur critère pour finalement obtenir une dépendance en cosh propre à un critère de type Gurson. Trois coefficients α , q_1 et q_2 sont intégrés empiriquement dans le critère pour être identifiés via des simulations numériques. Le critère est basé sur la définition d'une cission effective notée $\tau_*^{(k)}$ pour chaque système k et prend la forme

$$\left(\frac{\bar{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_*^{(k)}}\right)^2 + \alpha \frac{2}{45} f \left(\frac{\bar{\sigma}_{eq}}{\tau_*^{(k)}}\right)^2 + 2q_1 f \cosh\left(q_2 \sqrt{\frac{3}{20}} \frac{\bar{\sigma}_m}{\tau_*^{(k)}}\right) - 1 - (q_1 f)^2 = 0. \quad (2.29)$$

Pour chaque système k , la surface seuil est définie comme $\tau_*^{(k)} - \tau_0 = 0$. La surface seuil effective résulte de l'intersection de ces différentes surfaces seuils. Pour le cas particulier d'un chargement purement hydrostatique, et sous la condition que $0 \leq q_1 f \leq 1$, le critère devient

$$\frac{\bar{\sigma}_m}{\tau_0} = \frac{1}{q_2} \sqrt{\frac{20}{3}} \operatorname{arccosh}\left(\frac{1 + (q_1 f)^2}{2q_1 f}\right) = -\frac{1}{q_2} \sqrt{\frac{20}{3}} \ln(q_1 f). \quad (2.30)$$

Les trois coefficients sont identifiés à partir de simulations numériques par éléments finis sur une microstructure présentant une unique cavité en son centre, de sorte à obtenir un bon accord entre les simulations et le critère. En pratique, le critère proposé est exclusivement dédié aux monocristaux poreux cubiques à faces centrées, où $\alpha = 6.456$, $q_1 = 1.471$ et $q_2 = 1.325$ (on souligne que $q_2 \sqrt{3/20} \approx 0.513$). On note que le critère est tributaire des résultats des simulations numériques via les coefficients d'ajustement. Le critère de plasticité est principalement employé dans la thèse de [Han \(2012\)](#) pour estimer la ductilité d'un acier inoxydable austénitique constitutif d'internes de cuve dans les réacteurs à eau pressurisée.

Monocristaux poreux au comportement plastique par [Paux et al. \(2015\)](#)

[Paux et al. \(2015, 2018\)](#), sur la plasticité des monocristaux poreux, proposent un critère de résistance à partir d'une approche de type [Gurson \(1977\)](#) où le milieu poreux est idéalisé comme un assemblage de sphères creuses. Le critère est applicable à tout type de géométrie cristalline. Localement, le comportement cristallin est approché par le biais d'inégalités de convexité. Pour un chargement déviatorique, le critère nécessite une régularisation en considérant le cas asymptotique d'un monocristal dense (où la porosité est nulle). Le point hydrostatique est amélioré par une étude approfondie où le comportement du cristal est décrit sans recours à des inégalités de convexité. Pour un chargement hydrostatique, cette approche est exacte pour des milieux

localement isotropes mais la précision des résultats se dégrade pour des matériaux localement anisotropes. Par soucis de simplicité, mais aussi parce que les résultats se dégradent pour de fortes anisotropies, les cissions critiques $\tau_0^{(k)}$ sont considérées comme identiques pour tous les systèmes de glissement. Un coefficient q_1 est intégré empiriquement dans le critère pour être identifié via des simulations numériques. Ce coefficient a la même signification que dans le critère (2.29) et sa signification est expliquée dans [Tvergaard \(1982\)](#). Finalement, le critère prend la forme

$$\left(\frac{1}{\tau_0} \left(\sum_{k=1}^K |\bar{\sigma} \cdot \mu^{(k)}|^n\right)^{1/n}\right)^2 + 2fq_1 \cosh\left(q_2 \frac{\bar{\sigma}_m}{\tau_0}\right) - 1 - (q_1 f)^2 = 0 \quad (2.31)$$

où l'exposant n est un paramètre de régularisation (non un exposant de viscosité, dans le cas présent) et où le coefficient q_2 doit être évalué numériquement. Pour le cas particulier d'un chargement hydrostatique, le critère prend la même forme que l'expression (2.30). Le coefficient q_1 est identifié à partir de simulations numériques par méthode FFT sur une microstructure présentant une unique cavité en son centre, de sorte à obtenir un bon accord entre les simulations et le critère. Pour un cristal de type cubique à faces centrées, $q_1 = 2.2$ et $q_2 = 0.49$ (voir la thèse de [Paux \(2017\)](#)). On souligne que la valeur de q_2 est proche de 0.513. Le coût numérique pour évaluer le coefficient q_2 semble raisonnable (intégration sur la sphère unité d'une fonction à minimiser dans l'espace des tenseurs déviatoriques). On note que [Paux et al. \(2015\)](#) proposent une autre valeur du coefficient $q_1 = 1.59$ identifié à partir des simulations numériques par éléments finis de [Han et al. \(2013\)](#). Le critère de plasticité est principalement employé dans la thèse de [Paux \(2017\)](#) pour estimer la réponse mécanique de polycristaux poreux à cavités intragranulaires via des simulations numériques.

Monocristaux poreux au comportement viscoplastique par [Mbiakop et al. \(2015\)](#)

Le travail de [Mbiakop et al. \(2015\)](#), cette fois-ci sur la viscoplasticité des monocristaux poreux, propose une estimation à partir de l'approche variationnelle basée sur un composite linéaire de comparaison proposée par [Ponte Castañeda \(1991\)](#). L'estimation est applicable pour tout type de cristaux, et ce pour une grande variété de forme et de distribution des cavités. En pratique, la forme et la distribution des cavités est choisie ellipsoïdale. L'estimation construite à partir de l'approche de [Ponte Castañeda \(1991\)](#) nécessite un traitement particulier pour le point hydrostatique. Le point hydrostatique est amélioré par une étude approfondie d'un cristal à cavités sphériques ayant une infinité de systèmes de glissement. L'amélioration nécessite donc de supposer une isotropie du comportement local du matériau. L'estimation résultant de cette approche dépend de K tenseurs d'ordre quatre relatifs aux K systèmes de glissement. Ces tenseurs intègrent la description complète de la microstructure (tenseurs de Schmid et viscosité, orientation, forme et distribution des cavités) et doivent être évalués numériquement. Le coût numérique pour évaluer ces tenseurs semble raisonnable (intégration sur la sphère unité de fonctions tensorielles d'ordre quatre, inversion de tenseurs d'ordre quatre). L'estimation est appliqué aux cristaux cubiques à faces centrées, cubiques centrés et hexagonaux compacts. Des simulations par éléments finis sur des microstructures contenant des cavités réparties aléatoirement permettent de valider l'estimation. Additionnellement, [Mbiakop](#) et coauteurs proposent un critère de plasticité dérivant de l'estimation en viscoplasticité. Le critère est étendu pour finalement prendre la forme d'un critère de type Gurson généralisé aux cristaux à cavités ellipsoïdales. Après calibration du critère avec des simulations numériques, les résultats sont en accord avec ceux de [Han et al. \(2013\)](#) et [Paux et al. \(2015\)](#). Ce travail est complété dans la thèse de [Mbiakop \(2015\)](#) par la prise en compte de l'évolution de la porosité.

Monocristaux poreux au comportement viscoplastique par Song et Ponte Castañeda (2017a)

Song et Ponte Castañeda (2017a), sur la viscoplasticité des monocristaux poreux, proposent une estimation à partir de la méthode variationnelle de second-ordre dite « fully optimized » de Ponte Castañeda (2015) couplée avec l'approche itérative de Agoras et Ponte Castañeda (2013). Le couplage des deux méthodes améliore les résultats pour le point hydrostatique. L'estimation s'applique à tout type de géométrie cristalline pour des cavités de forme et de distribution variées. Elle prend en compte aussi bien l'évolution de la forme et de la distribution des cavités que la rotation du réseau cristallin. Aucun ajustement particulier n'est considéré pour le point hydrostatique puisque le procédé itératif est précisément employé pour améliorer ce point en particulier (en suivant la démarche itérative utilisée par Idiart (2007)). L'estimation est itérative et doit être évaluée numériquement. Elle nécessite l'évaluation des solutions de $4K$ équations non-linéaires à chaque itération. Ce système d'équations peut être résolu par la méthode de Newton-Raphson. L'estimation est appliquée aux cristaux cubiques à faces centrées et hexagonaux compacts dans Song et Ponte Castañeda (2017b) et est plutôt en bon accord avec les simulations numériques de Mbiakop *et al.* (2015).

5 Conclusion

Les travaux de Han *et al.* (2013), Paux *et al.* (2015, 2018), Mbiakop *et al.* (2015) et Song et Ponte Castañeda (2017a,b) montrent l'impact significatif de l'anisotropie cristalline sur la réponse de monocristaux poreux. De plus, il a été montré que la forme et la distribution des cavités, la viscosité des mécanismes de déformation plastique ainsi que l'évolution de la microstructure ont un fort impact sur les résultats. Il a été observé que généralement, les approches employées utilisent les informations du point hydrostatique dans leurs dérivations.

Le problème physique exposé dans le chapitre précédent focalise ce travail de recherche à l'étude de monocristaux poreux où les cavités sont de forme sphérique et où leur distribution est isotrope. Le problème de départ implique aussi que la géométrie du cristal soit de type cubique à face centrée mais cette restriction peut facilement être étendue à tout cristal présentant une symétrie cubique.

L'idée de ce travail est de proposer plusieurs approches purement théoriques, dont une particulièrement originale et encore jamais mise en œuvre pour des matériaux cristallins (voir chapitre 4), pour estimer le comportement de monocristaux poreux cubiques en viscoplasticité en se basant sur la gamme de potentiels de la section 2 et sur les principes variationnels de la section 3. Les qualités de chaque approche peuvent ensuite être exploitées dans le but de proposer une estimation présentant un bon compromis entre facilité d'utilisation et précision, bien adapté au cadre industriel. *In fine*, cette estimation peut servir à évaluer le comportement viscoplastique de polycristaux poreux.

Chapitre 3

Monocristal poreux idéalisé comme un assemblage de Hashin

Le monocristal poreux est idéalisé comme un assemblage de sphères creuses. Ce chapitre présente au préalable la méthode de [Gurson \(1977\)](#) permettant d’approcher le comportement d’une sphère creuse, faite ici d’un matériau cristallin. Deux démarches s’appuyant sur cette méthode sont ensuite développées. La première démarche exploite la gamme de potentiels présentée dans le chapitre précédent tandis que la deuxième démarche consiste à approcher cette gamme de potentiels par le biais d’inégalités de convexité. Finalement, une étude approfondie pour le point hydrostatique permet de proposer une estimation dont la construction est similaire à celle de [Paux *et al.* \(2015\)](#). Les comportements limites linéaire visqueux et parfaitement plastique ainsi que les comportements asymptotiques de cristaux fortement anisotropes sont systématiquement explorés dans le but de confronter l’approche de type Gurson à l’approche des laminés de [Idiart \(2008\)](#) présentée dans le chapitre suivant.

Sommaire

1	Introduction	38
2	Assemblage de Hashin	38
3	Cristaux à symétrie cubique	40
4	Approximations sur les cristaux cubiques	41
5	Chargement hydrostatique	42
6	Surface de jauge	44
7	Conclusion	46

1 Introduction

Le monocristal poreux est idéalisé comme un assemblage de sphères creuses homothétiques se déformant de manière homogène. Cette approche a originellement été proposée par Gurson (1977) pour modéliser la croissance de cavités dans des matériaux isotropes au comportement plastique. Elle a été par la suite employée à de nombreuses reprises pour sa précision et sa simplicité (voir (Hervé *et al.*, 1991), (Michel et Suquet, 1992), (Benzerga et Leblond, 2010) et les références incluses). Ces travaux présument généralement une isotropie locale car les estimations résultant de cette hypothèse sont exactes pour un chargement hydrostatique (lorsque la matrice est incompressible). Cependant, l’approche de type Gurson peut s’appliquer à des matériaux localement anisotropes, même si la précision des résultats est sensée se dégrader lorsque l’anisotropie plastique s’accroît.

2 Assemblage de Hashin

En suivant l’approche initiée par Gurson (1977), le volume élémentaire représentatif est choisi ici comme un assemblage fractal d’une infinité de sphères creuses homothétiques remplissant tout l’espace (voir par exemple Garajeu *et al.* (2000)).

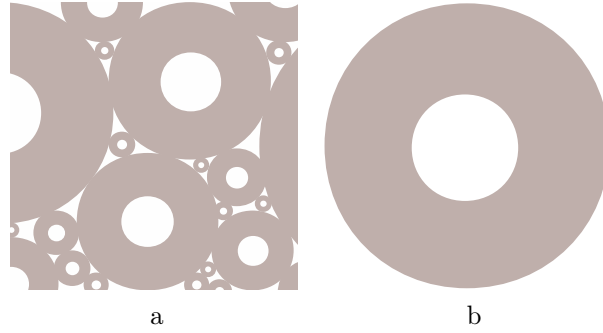


FIGURE 3.1 – a : Assemblage de sphères creuses homothétiques. b : Motif élémentaire sur lequel se base l’approche de Gurson (1977).

Pour ce type de microstructure, un champ de vitesses test correspondant à une déformation homogène de chaque sphère est cinématiquement compatible puisque toutes les sphères ont le même rapport de forme. Ce champ cinématiquement admissible pour une sphère creuse correspond, par extension, à un champ cinématiquement admissible pour l’assemblage de Hashin (1962). Le potentiel effectif de dissipation \tilde{w} associé à cette microstructure peut être approché (et même borné) en évaluant le potentiel effectif d’une seule sphère de l’assemblage soumise à un champ de vitesses test de la forme

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \bar{D}_m \frac{b^3}{r^2} \boldsymbol{\xi} + \bar{D}_d \cdot \mathbf{x}, \quad (3.1)$$

où b est le rayon de la sphère, $r = |\mathbf{x}|$, $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}/|\mathbf{x}|$, et \mathbf{x} est le vecteur position relatif au centre de la sphère. La partie radiale du champ de vitesses test décrit de manière exacte l’expansion de la sphère creuse, du moins lorsqu’elle est faite d’un matériau isotrope incompressible, tandis que la partie linéaire portée par \mathbf{x} correspond à un taux de déformation uniforme et reste une approximation. Le taux de déformation $\mathbf{D} = \nabla \otimes_s \mathbf{u}(\mathbf{x})$ correspondant au champ de vitesses test équivaut à

$$\mathbf{D} = -3\bar{D}_m \frac{b^3}{r^3} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \bar{D}_d. \quad (3.2)$$

Le principe variationnel (2.17) est appliqué à la microstructure particulière de la sphère creuse, en utilisant le champ test (3.2). Le champ test n'est pas exactement le champ minimisant le principe (2.17), mais il permet d'estimer par excès le principe (2.17), et de manière générale il permet de borner le potentiel effectif de dissipation de la microstructure par

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}) \leq (1-f) \frac{1}{(4/3)\pi(b^3-a^3)} \int_S \int_a^b w(\mathbf{D}) r^2 dr dS(\boldsymbol{\xi}) \quad (3.3)$$

ou encore par

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}) \leq \frac{1}{(4/3)\pi b^3} \int_S \int_a^b w(\mathbf{D}) r^2 dr dS(\boldsymbol{\xi}) \quad (3.4)$$

où S est la sphère unité et a est le rayon de la cavité tel que $f = (a/b)^3$. En incorporant le champ (3.2) dans la dernière inégalité, on obtient

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}) \leq \frac{1}{(4/3)\pi b^3} \int_S \int_a^b w \left(-3\bar{D}_m \frac{b^3}{r^3} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \bar{\mathbf{D}}_d \right) r^2 dr dS(\boldsymbol{\xi}). \quad (3.5)$$

Pour un chargement purement hydrostatique, si w caractérise le comportement d'un matériau isotrope incompressible (ce qui n'est pas le cas dans ce travail), alors l'inégalité précédente devient une égalité.

On considère maintenant une fonction convexe w_+ respectant l'inégalité $w \leq w_+$. La fonction w_+ sera détaillée et utilisée plus tard, mais le fait même que $w \leq w_+$ permet de constater qu'il existe une fonction \tilde{w}_+ respectant l'inégalité $\tilde{w} \leq \tilde{w}_+$ définie comme

$$\tilde{w}_+(\bar{\mathbf{D}}) \leq \frac{1}{(4/3)\pi b^3} \int_S \int_a^b w_+(\mathbf{D}) r^2 dr dS(\boldsymbol{\xi}) \quad (3.6)$$

et caractérisant le comportement d'une sphère creuse faite d'un matériau plus rigide que le matériau de référence.

En incorporant le champ (3.2) dans la dernière inégalité, on obtient

$$\tilde{w}_+(\bar{\mathbf{D}}) \leq \frac{1}{(4/3)\pi b^3} \int_S \int_a^b w_+ \left(-3\bar{D}_m \frac{b^3}{r^3} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \bar{\mathbf{D}}_d \right) r^2 dr dS(\boldsymbol{\xi}). \quad (3.7)$$

Par la suite, deux estimations sont proposées, l'une nommée HSA, l'autre nommée HSA+ pour « Hollow Sphere Assemblage », construites chacune à partir des expressions (3.4)-(3.5) et (3.6)-(3.7), respectivement. Ces deux types d'approches sur une sphère creuse, bien que classiques, n'ont pas encore été explorées dans le cas particulier de matériaux cristallins viscoplastiques. Une attention particulière sera accordée à l'étude des deux approches pour le cas d'un chargement purement hydrostatique. Le fait que $\tilde{w} \leq \tilde{w}_+$ implique dès maintenant que la première approche est plus précise que la seconde, qui trouvera tout de même son utilité par la suite.

Cas particulier d'un chargement purement déviatorique

Localement, les taux de déformations tests dans la sphère creuse ne dépendent ni de r ni de $\boldsymbol{\xi}$ lorsque la microstructure est soumise à un taux de déformation effectif purement déviatorique. L'approche de type Gurson devient équivalente à une approche de type Voigt, où les champs de déformation sont uniformes dans la microstructure. L'expression (3.5) prend la forme

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}_d) \leq (1-f)w(\bar{\mathbf{D}}_d) \quad (3.8)$$

pour finalement ne plus dépendre de la géométrie de la microstructure, seulement de la porosité et des propriétés locales du cristal. De même,

$$\tilde{w}_+(\bar{\mathbf{D}}_d) \leq (1-f)w_+(\bar{\mathbf{D}}_d). \quad (3.9)$$

3 Cristaux à symétrie cubique

Le changement de variables $r = ae^{\tau/3}$ avec $dr = a/3e^{\tau/3}d\tau$ dans l'expression (3.5) conduit à

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}) \leq \int_0^t \langle w(-3\bar{D}_m e^{t-\tau} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \bar{\mathbf{D}}_d) \rangle e^{-(t-\tau)} d\tau \quad (3.10)$$

où $t = -\ln f$. Il est rappelé que la notation $\langle x \rangle$ fait référence à la moyenne orientationnelle de x sur la sphère unité S telle que $\langle x \rangle = 1/(4\pi) \int_S x dS(\boldsymbol{\xi})$. Le changement de variables trouve son intérêt dans le chapitre suivant. Il permet notamment de rendre l'estimation indépendante des dimensions de la microstructure, seulement de son aspect, à une étape de la construction de l'estimation où les propriétés du matériau constitutif n'ont pas encore été renseignées. Le changement de variables retranscrit simplement l'idée que la seule variable microstructurale intervenant dans l'approche sur une sphère creuse faite d'un matériau quelconque est la porosité. En général, les estimations dérivant de l'approche de Gurson rencontrées dans la littérature sont rendues indépendantes des rayons a et b après intégration du comportement local. La démarche qui va suivre, nommée ici approche HSA, exploite la gamme de potentiels présentée dans le chapitre précédent et l'intègre comme propriété constitutive de la sphère creuse. Cette approche pourra entre autre servir de comparatif à l'approche présentée dans le chapitre suivant.

Viscoplasticité

La matrice de la sphère creuse est faite d'un matériau cristallin au comportement viscoplastique caractérisé par le potentiel en contrainte de type loi puissance (2.8). Le potentiel de dissipation associé peut être évalué par la transformée de Legendre (2.3). La dernière expression devient

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}) \leq \int_0^t \sup_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{T}_d} \left\langle \boldsymbol{\sigma}_d \cdot (-3\bar{D}_m e^{t-\tau} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \bar{\mathbf{D}}_d) - \sum_{k=1}^K \frac{\tau_0^{(k)} \dot{\gamma}_0}{n+1} \left| \frac{\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \right|^{n+1} \right\rangle e^{-(t-\tau)} d\tau \quad (3.11)$$

et peut être évaluée numériquement (voir annexe D section 4). Elle constitue une première estimation du comportement viscoplastique d'une sphère creuse faite d'un matériau cristallin, et par extension du comportement viscoplastique d'un monocristal poreux. Cette estimation peut être déclinée pour les cas limites de la viscosité linéaire et de la plasticité parfaite.

Viscosité linéaire

Dans le cas linéaire où $n = 1$, le potentiel de dissipation w prend la forme particulière décrite par l'expression (2.11). Par conséquent, l'expression (3.10) devient

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}) \leq \int_0^t \left\langle \frac{1}{2\dot{\gamma}_0} (-3\bar{D}_m e^{t-\tau} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \bar{\mathbf{D}}_d) \cdot \mathbb{L} \cdot (-3\bar{D}_m e^{t-\tau} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \bar{\mathbf{D}}_d) \right\rangle e^{-(t-\tau)} d\tau. \quad (3.12)$$

Il est possible d'intégrer sur la sphère unité certains termes de l'inégalité précédente (voir annexe B section 3, notamment l'expression (B.14)). Après intégration par rapport à la variable τ , on obtient

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}) \leq \frac{1}{2\dot{\gamma}_0} (1-f) \left(\frac{1}{f} 9\bar{D}_m^2 \kappa + \bar{\mathbf{D}}_d \cdot \mathbb{L} \cdot \bar{\mathbf{D}}_d \right) \quad (3.13)$$

où $\kappa = \langle \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbb{L} \cdot \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} \rangle$ est un coefficient à déterminer numériquement (dans le cas général). On rappelle que pour des cristaux cubiques faiblement anisotropes, le tenseur \mathbb{L} s'écrit sous la forme $\mathbb{L} = 1/\alpha \mathbb{K}_a + 1/\beta \mathbb{K}_b$. Le coefficient κ peut alors être déterminé exactement comme $\kappa = 4/(15\alpha) + 2/(5\beta)$ (voir annexe B section 3,

notamment les expressions (B.12) et (B.13)).

Plasticité

Dans le cas parfaitement plastique où $n \rightarrow \infty$, le potentiel de dissipation w prend la forme particulière décrite par l'expression (2.13). Par conséquent, l'expression (3.10) devient

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}) \leq \int_0^t \sup_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{P}} \langle \boldsymbol{\sigma}_d \cdot (-3\bar{\mathbf{D}}_m e^{t-\tau} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \bar{\mathbf{D}}_d) \rangle e^{-(t-\tau)} d\tau \quad (3.14)$$

et peut être évaluée numériquement (voir annexe D section 4).

4 Approximations sur les cristaux cubiques

Le potentiel en contrainte de type loi puissance se prête mieux à certaines applications sous la forme

$$u(\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{k=1}^K \frac{\tau_0^{(k)} \dot{\gamma}_0}{n+1} \left(\frac{\boldsymbol{\sigma}}{\tau_0^{(k)}} \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)} \otimes \boldsymbol{\mu}^{(k)} \cdot \frac{\boldsymbol{\sigma}}{\tau_0^{(k)}} \right)^{(n+1)/2}. \quad (3.15)$$

Une inégalité de convexité (voir annexe B section 2) conduit à

$$u(\boldsymbol{\sigma}) \geq \frac{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0}{n+1} \left(\frac{1}{\bar{\tau}_0} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbb{M} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right)^{(n+1)/2} \quad (3.16)$$

où $\bar{\tau}_0 = \sum_{k=1}^K \tau_0^{(k)}$. À partir de l'inégalité précédente, le potentiel dual w peut être majoré par la fonction

$$w(\mathbf{D}) \leq w_+(\mathbf{D}) = \begin{cases} \frac{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \left(\frac{1}{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0^2} \mathbf{D} \cdot \mathbb{L} \cdot \mathbf{D} \right)^{(m+1)/2} & \text{si } \text{tr} \mathbf{D} = 0, \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.17)$$

où $m = 1/n$. L'annexe B section 2 détaille les calculs permettant d'obtenir la dernière inégalité. La fonction w_+ est considérée pour l'intérêt de sa forme explicite, contrairement au potentiel w dont la forme n'est pas connue explicitement, du moins en viscoplasticité et en plasticité parfaite. La démarche qui suit, nommée ici HSA+, exploite le potentiel w_+ (non pas le potentiel w), et consiste finalement à idéaliser la matrice cristalline par un matériau à symétrie cubique plus rigide mais dont le comportement est moins complexe à décrire. Toujours en appliquant la méthode de Gurson, le potentiel effectif de dissipation \tilde{w}_+ de la microstructure est approché par l'inégalité (3.6).

Viscoplasticité

La matrice de la sphère creuse est faite d'un matériau dont le comportement est caractérisé par le potentiel w_+ . L'inégalité (3.6) devient

$$\tilde{w}_+(\bar{\mathbf{D}}) \leq \frac{1}{(4/3)\pi b^3} \int_S \int_a^b \frac{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \left(\frac{1}{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0^2} \mathbf{D} \cdot \mathbb{L} \cdot \mathbf{D} \right)^{(m+1)/2} r^2 dr dS(\boldsymbol{\xi}). \quad (3.18)$$

Appliquer l'inégalité de Cauchy-Schwarz à la dernière expression permet de l'intégrer explicitement sur la sphère unité. Cette manipulation implique une perte d'information (due au procédé d'inégalité) mais permet de borner la dernière expression par

$$\tilde{w}_+(\bar{\mathbf{D}}) \leq \frac{1}{(4/3)\pi b^3} \int_a^b (4\pi)^{(1-m)/2} \frac{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \left(\int_S \frac{1}{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0^2} \mathbf{D} \cdot \mathbb{L} \cdot \mathbf{D} dS(\boldsymbol{\xi}) \right)^{(m+1)/2} r^2 dr. \quad (3.19)$$

En remplaçant le champ de déformation éligible $\mathbf{D} = -3\bar{D}_m b^3 / r^3 \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \bar{\mathbf{D}}_d$ dans la dernière expression, on obtient

$$\tilde{w}_+(\bar{\mathbf{D}}) \leq \frac{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \int_f^1 \left(\frac{1}{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0^2} 9\bar{D}_m^2 \frac{\kappa}{y^2} + \frac{1}{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0^2} \bar{\mathbf{D}}_d \cdot \mathbb{L} \cdot \bar{\mathbf{D}}_d \right)^{(m+1)/2} dy, \quad (3.20)$$

où $\kappa = \langle \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbb{L} \cdot \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} \rangle$. Pour des cristaux cubiques faiblement anisotropes, on rappelle que le coefficient κ peut être déterminé exactement comme $\kappa = 4/(15\alpha) + 2/(5\beta)$ (voir annexe B section 3, notamment les expressions (B.12) et (B.13)). Les calculs permettant d'aboutir à la dernière expression sont détaillés dans l'annexe B section 3. Cette deuxième estimation du comportement viscoplastique d'une sphère creuse faite d'un matériau cristallin, et par extension du comportement viscoplastique d'un monocristal poreux, peut être déclinée pour les cas limites de la viscosité linéaire et de la plasticité parfaite.

Viscosité linéaire

Pour un matériau au comportement linéaire visqueux où $m = 1$ (et $n = 1$), l'inégalité (3.17) devient une égalité et correspond au potentiel de dissipation (2.11) de sorte que le potentiel w_+ corresponde exactement à w . De plus, l'inégalité de Cauchy-Schwarz est exacte pour $m = 1$. La dernière expression s'intègre alors comme

$$\tilde{w}_+(\bar{\mathbf{D}}) = \frac{1}{2\dot{\gamma}_0} (1-f) \left(\frac{1}{f} 9\bar{D}_m^2 \kappa + \bar{\mathbf{D}}_d \cdot \mathbb{L} \cdot \bar{\mathbf{D}}_d \right) \quad (3.21)$$

pour correspondre exactement à l'inégalité (3.13) obtenue par la première approche dans la sous-section précédente ($\tilde{w} = \tilde{w}_+$). On retrouve la forme quadratique en \bar{D}_m et en $\bar{\mathbf{D}}_d$.

Plasticité

Pour un matériau au comportement parfaitement plastique où $m \rightarrow 0$ (alternativement $n \rightarrow \infty$), l'expression (3.20) devient

$$\tilde{w}_+(\bar{\mathbf{D}}) \leq \bar{\tau}_0^{1/2} \int_f^1 \left(9\bar{D}_m^2 \frac{\kappa}{y^2} + \bar{\mathbf{D}}_d \cdot \mathbb{L} \cdot \bar{\mathbf{D}}_d \right)^{1/2} dy. \quad (3.22)$$

Par soucis de clarté, la dernière expression est réécrite pour les cristaux faiblement anisotropes comme

$$\tilde{w}_+(\bar{\mathbf{D}}) \leq \tau_0 \int_f^1 \left(9\bar{D}_m^2 \frac{\kappa^*}{y^2} + \bar{\mathbf{D}}_d \cdot \mathbb{L}^* \cdot \bar{\mathbf{D}}_d \right)^{1/2} dy \quad (3.23)$$

où les termes sans dimension κ^* et \mathbb{L}^* sont définis tels que $\kappa^* = K/\tau_0 \kappa$ et $\mathbb{L}^* = K/\tau_0 \mathbb{L}$. Le critère de plasticité dérivant de la dernière expression s'écrit (voir annexe B section 4)

$$\frac{\bar{\boldsymbol{\sigma}}_d}{\tau_0} \cdot \mathbb{M}^* \cdot \frac{\bar{\boldsymbol{\sigma}}_d}{\tau_0} + 2f \cosh \left(\frac{1}{\sqrt{\kappa^*}} \frac{\bar{\sigma}_m}{\tau_0} \right) - 1 - f^2 = 0 \quad (3.24)$$

où $\mathbb{M}^* = \tau_0 / K \mathbb{M}$ est sans dimension. Le critère de plasticité présente la dépendance en cosh caractéristique d'un critère de type Gurson rencontré dans les travaux de Han (2012) et Paux *et al.* (2015).

5 Chargement hydrostatique

La matrice de la sphère creuse est faite d'un matériau dont le comportement est caractérisé par w (démarche HSA). Dans le cas d'un chargement purement hydrostatique, le champ de vitesses correspond à une expansion radiale des sphères. À la vue de la propriété d'homogénéité de degré $1 + 1/n$ de la fonction w , l'expression (3.10) prend la forme

$$\tilde{w}(\bar{D}_m \mathbf{I}) \leq \langle w(\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi}) \rangle n \left(f^{-1/n} - 1 \right) |3\bar{D}_m|^{1/n+1}. \quad (3.25)$$

Comme vu dans le chapitre précédent, le potentiel effectif de dissipation \tilde{w} prend une forme particulière pour un chargement hydrostatique. L'expression (2.25) conduit à une inégalité concernant la contrainte d'écoulement hydrostatique de sorte que

$$\tilde{\sigma}_h \leq \alpha_{HSA}(n)n \left(f^{-1/n} - 1 \right) \quad (3.26)$$

où

$$\alpha_{HSA}(n) = \frac{n+1}{n} \gamma_0^{1/n} \langle w(\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi}) \rangle \quad (3.27)$$

est un coefficient à évaluer numériquement (voir annexe D section 4).

Viscoplasticité

En viscoplasticité, la dernière expression devient

$$\alpha_{HSA}(n) = \frac{n+1}{n} \sup_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{T}_d} \left\langle \boldsymbol{\sigma}_d \cdot (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi}) - \sum_{k=1}^K \frac{\tau_0^{(k)}}{n+1} \left| \frac{\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \right|^{n+1} \right\rangle. \quad (3.28)$$

Les expressions (3.26) et (3.28) constituent une estimation de type Gurson pour la contrainte d'écoulement hydrostatique. L'estimation exhibe la même dépendance fonctionnelle à la porosité que l'estimation de Gurson pour un matériau poreux à matrice de von Mises (voir Michel et Suquet (1992)), et dépend de l'anisotropie plastique du cristal seulement par le facteur $\alpha_{HSA}(n)$. De manière analogue, pour un matériau dont le comportement est caractérisé par w_+ (démarche HSA+), l'expression (3.26) définit la contrainte d'écoulement hydrostatique où le coefficient $\alpha_{HSA+} \geq \alpha_{HSA}$ est tel que $\alpha_{HSA+}(n) = \bar{\tau}_0 (\kappa/\bar{\tau}_0)^{(1/n+1)/2}$.

L'expression précédente peut être simplifiée en exploitant l'homogénéité de degré $n+1$ en $\boldsymbol{\sigma}_d$ de w . En effet, en évaluant la fonction objective en $\lambda \boldsymbol{\sigma}_d$ et en optimisant par rapport à λ (une démarche similaire est présentée annexe A section 4), on obtient

$$\alpha_{HSA}(n) = \sup_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{T}_d} \left\langle \frac{|\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\sigma}_d \boldsymbol{\xi}|^{(n+1)/n}}{\left(\sum_{k=1}^K \tau_0^{(k)-n} |\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}|^{n+1} \right)^{1/n}} \right\rangle. \quad (3.29)$$

Pour rappel, on a $\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\sigma}_d \boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\sigma}_d \cdot (\boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi}) = \boldsymbol{\sigma}_d \cdot (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi})$. On note que la fonction objective dans la dernière expression est homogène de degré zéro en $\boldsymbol{\sigma}_d$, et par conséquent, l'ensemble admissible peut être restreint à des tenseurs de norme fixe. L'estimation de la contrainte d'écoulement hydrostatique en viscoplasticité peut être déclinée pour les cas limites de la viscosité linéaire et de la plasticité parfaite.

Viscosité linéaire

Dans le cas linéaire où $n = 1$, l'inégalité (3.26) devient

$$\tilde{\sigma}_h \leq \alpha_{HSA}(1) \frac{1-f}{f} \quad (3.30)$$

et

$$\alpha_{HSA}(1) = \langle \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbb{L} \cdot \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} \rangle = \frac{2}{15} \mathbb{K} \cdot \mathbb{L} \quad (3.31)$$

correspond au coefficient κ employé dans la section 4. Il est rappelé que pour des cristaux cubiques faiblement anisotropes, κ est connu exactement.

Plasticité

Quand l'exposant de viscosité $n \rightarrow \infty$, l'inégalité (3.26) correspond à

$$\tilde{\sigma}_h \leq -\beta_{HSA} \ln f \quad (3.32)$$

où

$$\beta_{HSA} = \lim_{n \rightarrow \infty} \alpha_{HSA}(n) = \sup_{\sigma_d \in \mathcal{P}} \langle \xi \cdot \sigma_d \xi \rangle = \max_{\sigma_d \in \mathcal{V}} \langle \xi \cdot \sigma_d \xi \rangle. \quad (3.33)$$

En plasticité, l'estimation de la contrainte d'écoulement hydrostatique correspond exactement à celle de [Paux et al. \(2015, 2018\)](#).

Déficience

Quand l'ensemble des tenseurs de Schmid $\mu^{(k)}$ forment *moins de cinq* systèmes linéairement indépendants et ne peuvent donc pas générer la totalité de l'ensemble \mathcal{T}_d des tenseurs déviatoriques, le cristal ne peut subir toute déformation incompressible arbitraire et est donc dit déficient. Dans ce cas, l'estimation (3.28) peut être infiniment grande. On peut montrer cela en introduisant le tenseur déviatorique μ_0 , orthogonal à tous les tenseurs de Schmid du cristal déficient. Pour rappel, μ_0 est orthogonal à $\mu^{(k)}$ si $\mu_0 \cdot \mu^{(k)} = 0$. En restreignant l'ensemble \mathcal{T}_d de l'expression (3.28) au sous ensemble de tenseurs colinéaires à μ_0 de la forme $\sigma_d = \lambda(\xi \cdot \mu_0 \xi) \mu_0$ on obtient l'inégalité

$$\alpha_{HSA}(n) \geq \frac{n+1}{n} \sup_{\lambda \in \mathbb{R}} \lambda \langle (\xi \cdot \mu_0 \xi)^2 \rangle. \quad (3.34)$$

Étant donné que la moyenne dans l'expression précédente est strictement positive, le supremum sur λ n'est pas borné et donc

$$\alpha_{HSA}(n) \rightarrow +\infty. \quad (3.35)$$

Ainsi, l'estimation (3.28) pour l'assemblage de sphères creuses prédit que tout monocristal poreux déficient est rigide sous chargement hydrostatique.

6 Surface de jauge

Pour des raisons de coût numérique, on recherche une estimation la plus analytique possible. L'estimation HSA+, bien moins complexe à évaluer que l'estimation HSA, mais moins précise, notamment pour un chargement purement déviatorique ou un chargement purement hydrostatique, est un bon candidat pour une implémentation dans un code de calcul. Une première possibilité consiste à ajuster le terme déviatorique et le terme hydrostatique de l'estimation HSA+ sur l'estimation HSA. Pour des cristaux cubiques, le potentiel effectif fourni par l'approche HSA+ est rappelé ici comme

$$\tilde{w}_+(\bar{\mathbf{D}}) \leq \frac{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \int_f^1 \left(\frac{1}{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0^2} 9 \bar{D}_m^2 \frac{1}{y^2} \left(\frac{4}{15\alpha} + \frac{2}{5\beta} \right) + \frac{1}{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0^2} \bar{\mathbf{D}}_d \cdot \left(\frac{1}{\alpha} \mathbb{K}_a + \frac{1}{\beta} \mathbb{K}_b \right) \cdot \bar{\mathbf{D}}_d \right)^{(m+1)/2} dy. \quad (3.36)$$

Pour un chargement purement déviatorique, imposer $\tilde{w}_+(\bar{\mathbf{D}}_d) = \tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}_d)$ revient à imposer $w_+(\bar{\mathbf{D}}_d) = w(\bar{\mathbf{D}}_d)$ (voir expressions (3.8) et (3.9)) et pour un chargement purement hydrostatique, imposer $\tilde{w}_+(\bar{D}_m \mathbf{I}) = \tilde{w}(\bar{D}_m \mathbf{I})$ revient à imposer $\alpha_{HSA+}(n) = \alpha_{HSA}(n)$. Le principal problème de cette démarche est que les deux coefficients α et β ainsi identifiés dépendent du chargement. Ce problème vient de l'équation relative à l'ajustement du

terme déviatorique. Dans le but de proposer une estimation la plus analytique possible, on s'oriente cette fois vers une méthode vue dans (Leblond *et al.*, 1994) proposant une approximation de la surface de jauge pour un assemblage de sphères creuses.

Surface de jauge de type Leblond *et al.* (1994)

Une surface de jauge est construite à partir de l'estimation HSA+ en suivant la démarche rencontrée dans (Leblond *et al.*, 1994). En plasticité, et pour des cristaux faiblement anisotropes, le critère de résistance de type Gurson dérivant de l'expression de \tilde{w}_+ (3.22) est rappelé ici comme

$$\frac{\bar{\sigma}_d}{\tau_0} \cdot \mathbb{M}^* \cdot \frac{\bar{\sigma}_d}{\tau_0} + 2f \cosh\left(\frac{1}{\sqrt{\kappa^*}} \frac{\bar{\sigma}_m}{\tau_0}\right) - 1 - f^2 = 0. \quad (3.37)$$

Pour ce type de critère, Leblond *et al.* (1994) proposent une extension de la surface de résistance à une surface de jauge en viscoplasticité. La surface de jauge de type (Leblond *et al.*, 1994) correspond ici à

$$\Sigma_d \cdot \mathbb{M}^* \cdot \Sigma_d + f \left(h(\Sigma_m) + \frac{n-1}{n+1} \frac{1}{h(\Sigma_m)} \right) - 1 - \frac{n-1}{n+1} f^2 = 0 \quad (3.38)$$

où

$$h(\Sigma_m) = \left(1 + \frac{1}{n} \left| \frac{1}{\sqrt{\kappa^*}} \Sigma_m \right|^{1+1/n} \right)^n. \quad (3.39)$$

Il est rappelé que $\Sigma = \bar{\sigma}/\lambda(\bar{\sigma})$. La surface de jauge de type (Leblond *et al.*, 1994) a été pensée de sorte à satisfaire trois conditions : correspondre exactement au critère de plasticité quand $n \rightarrow \infty$, correspondre exactement à l'approche de type Gurson sous chargement purement hydrostatique et enfin avoir une forme quadratique en viscosité linéaire.

Premièrement, quand $n \rightarrow \infty$, le fait que la fonction $h(x)$ soit équivalente à la fonction $\exp(|x|)$ et donc que $h(x) + 1/h(x)$ équivaut à $2 \cosh(x)$ satisfait la première condition. Deuxièmement, le point hydrostatique de l'expression (3.38) doit satisfaire la relation $h(\Sigma_m) = 1/f$. Pour un chargement purement hydrostatique, l'estimation de type Gurson de \tilde{u}_h , résumée par les expressions (2.26) et (3.28) est reliée au point hydrostatique de la surface de jauge par l'expression $\tilde{u}_h(\bar{\sigma}_m) = \dot{\gamma}_0 \tau_0^{-n} / (n+1)$. En évaluant $\bar{\sigma}_m$ à partir de cette expression, et en l'injectant dans l'expression $h(\Sigma_m) = 1/f$, on obtient bien une équivalence. La deuxième condition est alors vérifiée. Quand $n = 1$, la troisième condition est automatiquement vérifiée. Finalement, les expressions (3.38) et (3.39) définissent bien une surface de jauge de type (Leblond *et al.*, 1994).

Ajustements

Le point hydrostatique de la surface de jauge précédemment proposée peut être ajusté avec l'estimation HSA. La comparaison entre les coefficients α_{HSA} et α_{HSA+} permet d'identifier κ^* et de réécrire la fonction h comme

$$h(\Sigma_m) = \left(1 + \frac{1}{\alpha_{HSA}(n)} \frac{\tau_0}{n} |\Sigma_m|^{1+1/n} \right)^n. \quad (3.40)$$

Le point déviatorique de la surface de jauge peut aussi être ajusté de sorte à correspondre à une estimation pour monocristal dense (porosité nulle). Pour un chargement déviatorique, quand $f = 0$, la surface de jauge (2.28) s'écrit $\sum_{k=1}^K |\Sigma_d \cdot \mu^{(k)}|^{n+1} = 1$ tandis que (3.38) se réduit à $\Sigma_d \cdot \mathbb{M}^* \cdot \Sigma_d = 1$. Pour que les deux surfaces coïncident, le terme déviatorique $\Sigma_d \cdot \mathbb{M}^* \cdot \Sigma_d$ de l'expression (3.38) peut être substitué par le terme

$\sum_{k=1}^K |\Sigma_d \cdot \mu^{(k)}|^{n+1}$, puis élevé à la puissance $2/(n+1)$ de sorte à ce que dans la somme, la puissance la plus élevée soit une puissance de 2, par analogie avec (3.38). Finalement, la surface de jauge de type (Leblond *et al.*, 1994), dont le point hydrostatique correspond à l'estimation HSA et dont le terme déviatorique est remplacé pour correspondre à une estimation pour monocristal dense, prend la forme

$$\left(\sum_{k=1}^K |\Sigma_d \cdot \mu^{(k)}|^{n+1} \right)^{2/(n+1)} + f \left(h(\Sigma_m) + \frac{n-1}{n+1} \frac{1}{h(\Sigma_m)} \right) - 1 - \frac{n-1}{n+1} f^2 = 0 \quad (3.41)$$

où

$$h(\Sigma_m) = \left(1 + \frac{1}{\alpha_{HSA}(n)} \frac{\tau_0}{n} |\Sigma_m|^{1+1/n} \right)^n. \quad (3.42)$$

Cette démarche d'identification est fortement similaire à celle de Paux *et al.* (2015) et peut être vue comme une généralisation en viscoplasticité de son critère de plasticité. On remarque que la surface de jauge proposée ne contient finalement plus aucune spécificité provenant de l'estimation HSA+ mise à part la forme générale du critère de plasticité (3.37), notamment la dépendance en cosh de la contrainte moyenne, propre à tout critère de type Gurson. Cela implique qu'il aurait été possible d'atteindre le même résultat en se basant sur un critère de plasticité de type Gurson pour un matériau quelconque, comme par exemple un matériau de von Mises.

7 Conclusion

Les développements proposés sur un assemblage de sphères creuses faites d'un matériau à symétrie cubique, soit caractérisé par une loi puissance cristalline (approche HSA) soit caractérisé par un matériau à symétrie cubique plus rigide (approche HSA+), conduisent à deux estimations pour monocristaux poreux en viscoplasticité. L'estimation HSA est identique à celle de Paux *et al.* (2015, 2018) pour le point hydrostatique et correspond à une estimation de type Voigt pour le point déviatorique (borne supérieure). L'estimation HSA+ ne correspond à aucune borne pertinente à cause de l'emploi de l'inégalité de Cauchy-Schwarz mais elle intègre tout de même des informations sur l'anisotropie cristalline et sur la viscosité des déformations plastiques. En contrepartie, le coût numérique pour évaluer l'estimation HSA+ est bien moindre que pour l'estimation HSA : l'une requiert d'évaluer un coefficient invariable pour tout chargement puis d'évaluer une intégrale simple, l'autre requiert d'évaluer une intégrale triple d'une fonction à optimiser. Finalement, les deux estimations permettent (entre autre) de construire une surface de jauge pour des cristaux faiblement anisotropes, nommée à présent estimation LPS pour « Leblond, Perrin, Suquet », à partir de (Leblond *et al.*, 1994). Bien qu'elle ne permette pas l'étude de cristaux fortement anisotropes, cette estimation a une forme analytique simple et coïncide avec l'estimation HSA pour un chargement purement hydrostatique.

Chapitre 4

Monocristal poreux idéalisé comme un laminé de rang infini

Le monocristal poreux est maintenant idéalisé comme un laminé de rang infini obéissant à un procédé de laminage isotrope. Ce chapitre expose au préalable la manière de construire et d'employer des microstructures laminées séquentiellement. Le potentiel de dissipation d'un laminé de rang infini à phase inclusionnaire vide est déterminé de manière exacte pour une phase matricielle incompressible. L'étude est ensuite restreinte aux cristaux viscoplastiques à symétrie cubique et aboutit à une estimation à caractère de borne du potentiel de dissipation. Enfin, une revue détaillée du cas particulier où un laminé de rang infini à matrice cristalline est soumis à un chargement hydrostatique prouve que l'estimation du potentiel de dissipation est exacte (dans ce cas précis). Les comportements limites linéaire visqueux et parfaitement plastique ainsi que les comportements asymptotiques de cristaux fortement anisotropes sont systématiquement explorés dans le but de confronter les laminés de rang infini à l'assemblage de sphères creuses.

Sommaire

1	Introduction	48
2	Laminés de rang infini	48
3	Matériaux incompressibles	49
4	Cristaux à symétrie cubique	51
5	Chargement hydrostatique	52
6	Conclusion	55

1 Introduction

Le monocristal poreux est maintenant idéalisé comme un laminé de rang infini obéissant à un procédé de laminage isotrope. Le comportement de ce type de microstructure, initialement proposé par deBotton (2005) en deux dimensions (pour un cas très spécifique) puis généralisé par Idiart (2008), est décrit de manière exacte par un potentiel de dissipation. Bien que géométriquement irréalistes, ces microstructures laminées séquentiellement imitent de manière réaliste un large panel de matériaux biphasés de type inclusionnaire en incluant les matériaux poreux viscoplastiques (voir par exemple Idiart (2008) et Danas *et al.* (2008)). Étonnement, pour un chargement hydrostatique, ces laminés séquencés exhibent la même réponse exacte qu'un assemblage de sphères creuses quand la distribution des vides et le comportement local sont tous deux isotropes (voir Idiart (2007, 2008)); mais contrairement à l'approche de Gurson, cette approche fournit un résultat exact pour des matériaux localement anisotropes.

2 Laminés de rang infini

Un laminé séquencé est une construction itérative obtenue par stratification de matériaux laminés (qui eux même ont été obtenus par un procédé de laminage d'ordre inférieur) avec d'autres matériaux laminés, ou directement avec les phases homogénéisées du matériau multiphasé, de manière à produire une microstructure hiérarchique de complexité croissante. Le rang du laminé correspond au nombre d'opérations de laminage requises pour obtenir le laminé séquencé final. Un laminé séquencé à deux phases de type matrice-inclusion peut être formé en stratifiant à chaque étape le laminé avec la phase matricielle.

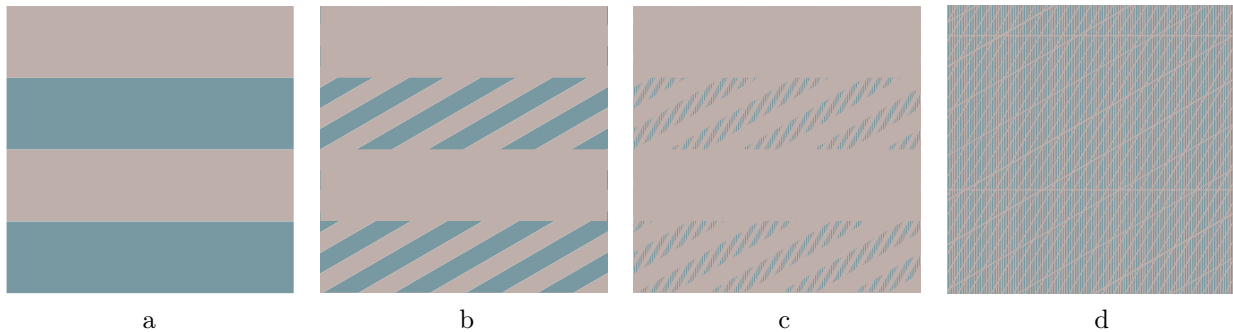


FIGURE 4.1 – a : Laminé séquencé d'ordre 1. b : Laminé séquencé d'ordre 2. c : Laminé séquencé d'ordre 3. d : Laminé séquencé d'ordre 3 avec une faible concentration de matrice.

La construction d'un laminé de rang infini à partir d'un laminé séquencé de rang N devient possible en considérant la concentration de matrice comme infinitésimale. À ce stade, la microstructure s'apparente à des membranes infiniment fines enclavant la phase inclusionnaire. Cette hypothèse permet la linéarisation de l'expression du potentiel effectif d'un laminé séquencé de rang N puis le passage à la limite $N \rightarrow \infty$. Ensuite, un laminé de rang infini avec une concentration de matrice finie est construit par le biais d'un schéma différentiel. L'idée est de considérer un laminé de rang infini avec une concentration infinitésimale de matrice comme la phase inclusionnaire d'un laminé de rang infini avec une concentration infinitésimale de matrice, et ainsi de suite. Une quantité infinitésimale de matrice est à chaque fois ajoutée au composite et en quelque sorte, après répétition du processus une infinité de fois, une concentration finie de matrice est obtenue.

Le schéma différentiel aboutie à une équation de type Hamilton-Jacobi où la concentration de la phase

inclusionnaire et les champs macroscopiques jouent respectivement le rôle des variables temporelle et spatiale. Une fonction de distribution caractérise la distribution de la phase inclusionnaire.

Dans [Idiart \(2008\)](#), il est précisé que le potentiel caractérisant le comportement d'un laminé de rang infini est convexe et satisfait toutes les bornes pertinentes. Le potentiel effectif $\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}) = \hat{w}(\bar{\mathbf{D}}, \tau = -\ln f)$ d'un laminé de rang infini est gouverné par l'équation aux dérivées partielles de type Hamilton-Jacobi

$$\partial_\tau \hat{w} + \mathcal{H}(\bar{\mathbf{D}}, \hat{w}, \partial_{\bar{\mathbf{D}}} \hat{w}) = 0, \quad \hat{w}(\bar{\mathbf{D}}, 0) = w^{(2)}(\bar{\mathbf{D}}), \quad (4.1)$$

où τ est la variable « temporelle » et $\bar{\mathbf{D}}$ est la variable « spatiale ». Les propriétés de la phase inclusionnaire sont définies par la condition initiale. À « l'instant » initial, quand $\tau = 0$, la phase inclusionnaire tend à occuper tout le domaine et le comportement effectif caractérisé par $\hat{w}(\bar{\mathbf{D}}, 0)$ équivaut au comportement de la phase inclusionnaire. À l'instant final, quand $\tau = t = -\ln c^{(2)}$, la phase inclusionnaire occupe la fraction volumique désirée et $\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}, t)$ caractérise le comportement effectif de la microstructure. Les propriétés de la matrice et la distribution de la phase inclusionnaire sont incorporées dans le Hamiltonien

$$\mathcal{H}(\bar{\mathbf{D}}, \hat{w}, \partial_{\bar{\mathbf{D}}} \hat{w}) = \hat{w} + \int_S \sup_{\mathbf{a}} \left[\partial_{\bar{\mathbf{D}}} \hat{w} \cdot (\mathbf{a} \otimes_s \boldsymbol{\xi}) - w^{(1)}(\bar{\mathbf{D}} + \mathbf{a} \otimes_s \boldsymbol{\xi}) \right] \nu(\boldsymbol{\xi}) dS(\boldsymbol{\xi}), \quad (4.2)$$

où $\nu(\boldsymbol{\xi})$ est une fonction de distribution qui sera spécifiée plus tard (une section de [Idiart \(2008\)](#) est consacrée aux fonctions de distribution) et où l'opération d'optimisation touche les fonctions $\mathbf{a}(\boldsymbol{\xi})$ définies sur la sphère unité S , où $\boldsymbol{\xi}$ correspond aux directions de laminage.

Pour une phase inclusionnaire vide, $w^{(2)} = 0$. Les propriétés de la matrice sont caractérisées par $w^{(1)} = w$ pour simplifier les notations. Modéliser une dispersion uniforme des inclusions dans toutes les directions équivaut à choisir une fonction de distribution isotrope $\nu(\boldsymbol{\xi}) = 1/(4\pi)$ (voir par exemple [Idiart \(2008\)](#)). Dans le cas d'un laminé de rang infini où la phase inclusionnaire est vide et distribuée de manière isotrope, l'équation de Hamilton-Jacobi prend la forme

$$\partial_\tau \hat{w} + \hat{w} + \sup_{\mathbf{a}} \langle \partial_{\bar{\mathbf{D}}} \hat{w} \cdot (\mathbf{a} \otimes_s \boldsymbol{\xi}) - w(\bar{\mathbf{D}} + \mathbf{a} \otimes_s \boldsymbol{\xi}) \rangle = 0, \quad \hat{w}(\bar{\mathbf{D}}, 0) = 0. \quad (4.3)$$

De récents travaux de Idiart sur les propriétés de la solution de l'équation de Hamilton-Jacobi (4.3) pour une phase inclusionnaire vide ont permis d'obtenir une expression variationnelle du potentiel effectif solution \hat{w} encore jamais présentée à ce jour, et constituant une manière totalement nouvelle d'utiliser les laminés de rang infinis. L'expression variationnelle du potentiel effectif solution \hat{w} est telle que

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}, t) = \min_{\mathbf{d} \in \mathcal{D}(t)} \min_{\mathbf{a} \in \mathcal{A}(\dot{\mathbf{d}})} \int_0^t \langle w(\bar{\mathbf{D}} + \mathbf{d} + \mathbf{a} \otimes_s \boldsymbol{\xi}) \rangle e^{-(t-\tau)} d\tau, \quad (4.4)$$

où

$$\mathcal{D}(t) = \{\mathbf{d}(\tau) \in \mathcal{T} : \mathbf{d}(t) = \mathbf{0}\} \quad (4.5)$$

et où

$$\mathcal{A}(\dot{\mathbf{d}}) = \{\mathbf{a}(\boldsymbol{\xi}) : \langle \mathbf{a} \otimes_s \boldsymbol{\xi} \rangle = \dot{\mathbf{d}}\}. \quad (4.6)$$

3 Matériaux incompressibles

Pour une matrice incompressible, l'équation de Hamilton-Jacobi (4.3) prend une forme particulière. Dans le cas où la trace de l'argument de w est non nulle, alors $w \rightarrow \infty$, $\tilde{w} \rightarrow \infty$ et la réponse de la microstructure est

incompressible. L'argument du potentiel w doit être exprimé comme purement déviatorique pour s'affranchir de toute réponse incompressible (et donc infinie) du matériau. La trace de l'argument de w est imposée comme nulle : $\text{tr}(\bar{\mathbf{D}} + \mathbf{a} \otimes_s \boldsymbol{\xi}) = 0$ et donc $\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\xi} = -\text{tr}\bar{\mathbf{D}}$. Aussi, le vecteur \mathbf{a} peut être décomposé en une partie portée par $\boldsymbol{\xi}$ et en une autre partie orthogonale à $\boldsymbol{\xi}$ notée \mathbf{a}_\perp tel que $\mathbf{a} = (\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\xi})\boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp = -\text{tr}\bar{\mathbf{D}}\boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp$. La restriction $\mathbf{a}_\perp \boldsymbol{\xi} = 0$ et le constat $\boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi} = 1/3\mathbf{I} + \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi}$ permettent de réécrire l'équation (4.3) comme

$$\partial_\tau \hat{w} + \hat{w} + \sup_{\mathbf{a}_\perp} \langle \partial_{\bar{\mathbf{D}}} \hat{w} \cdot (-\text{tr}\bar{\mathbf{D}} \boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) - w(-\text{tr}\bar{\mathbf{D}}\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \bar{\mathbf{D}}_d + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) \rangle = 0, \quad \hat{w}(\bar{\mathbf{D}}, 0) = 0. \quad (4.7)$$

De manière analogue, dans la solution générale (4.4) de l'équation de Hamilton-Jacobi, l'argument de trace nulle de w implique que $\mathbf{a} = -\text{tr}(\bar{\mathbf{D}} + \mathbf{d})\boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp$. Des développements présentés dans l'annexe C section 2 conduisent à une solution générale de l'équation de Hamilton-Jacobi pour une matrice incompressible telle que

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}, t) = \min_{\mathbf{d}_d \in \mathcal{D}_d(t)} \min_{\mathbf{a}_\perp \in \mathcal{A}_\perp(\dot{\mathbf{d}}_d)} \int_0^t \langle w(\bar{\mathbf{D}}_d + \mathbf{d}_d - 3\bar{\mathbf{D}}_m e^{t-\tau} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) \rangle e^{-(t-\tau)} d\tau \quad (4.8)$$

où

$$\mathcal{D}_d(t) = \{\mathbf{d}_d(\tau) \in \mathcal{T}_d : \mathbf{d}_d(t) = \mathbf{0}\} \quad (4.9)$$

et où

$$\mathcal{A}_\perp(\dot{\mathbf{d}}_d) = \{\mathbf{a}_\perp(\boldsymbol{\xi}) : \mathbf{a}_\perp \boldsymbol{\xi} = 0 \wedge \langle \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi} \rangle = \dot{\mathbf{d}}_d\}. \quad (4.10)$$

L'argument de w dans (4.7) ne dépend plus de la partie sphérique de \mathbf{d} . Par conséquent, l'ensemble $\mathcal{D}(t)$ se réduit aux fonctions tensorielles déviatoriques $\mathbf{d}_d(\tau)$ et l'ensemble des \mathbf{a} admissibles a été restreint au sous-ensemble des \mathbf{a}_\perp admissibles pour chaque instant τ .

En pratique, le manque d'informations sur les fonctions $\mathbf{d}_d(\tau)$ rend difficilement exploitable la solution (4.8). On cherche à estimer une borne supérieure pour $\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}, t)$ en restreignant les chemins candidats $\mathbf{d}_d(\tau)$. La démarche adoptée se résume à imposer $\mathbf{d}_d(\tau) = \mathbf{0}$ dans la solution générale (4.8). La pertinence de ce choix sera discutée et validée par la suite. L'expression (4.8) est alors bornée par

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}, t) \leq \min_{\mathbf{a}_\perp \in \mathcal{A}_\perp(\mathbf{0})} \int_0^t \langle w(\bar{\mathbf{D}}_d - 3\bar{\mathbf{D}}_m e^{t-\tau} (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi})) \rangle e^{-(t-\tau)} d\tau \quad (4.11)$$

où

$$\mathcal{A}_\perp(\mathbf{0}) = \{\mathbf{a}_\perp(\boldsymbol{\xi}) : \mathbf{a}_\perp \boldsymbol{\xi} = 0 \wedge \langle \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi} \rangle = \mathbf{0}\}. \quad (4.12)$$

La borne du potentiel de dissipation d'un laminé de rang infini à matrice incompressible (et à inclusions vides à répartition isotrope) est employée dans la section suivante pour construire une estimation dans la cas où la matrice incompressible est cristalline à symétrie cubique. Par la suite, une propriété essentielle de cette borne sera démontrée dans le cas d'un chargement hydrostatique.

Cas particulier d'un chargement déviatorique

Dans (4.11), les taux de déformations dans la matrice (l'argument de w) ne dépendent ni de $\boldsymbol{\xi}$ ni de \mathbf{a}_\perp lorsque la microstructure est soumise à un taux de déformation effectif purement déviatorique ($D_m = 0$). L'approche des laminés devient équivalente à une approche de type Voigt, où les champs mécaniques sont uniformes dans la microstructure. L'expression (4.11) prend la forme

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}_d, -\ln f) \leq (1-f)w(\bar{\mathbf{D}}_d) \quad (4.13)$$

pour finalement ne plus dépendre de la géométrie de la microstructure, seulement de la porosité et des propriétés locales du cristal. Les laminées de rang infini fournissent la même réponse que l'assemblage de sphères creuses pour un chargement déviatorique (voir chapitre 3 section 2).

4 Cristaux à symétrie cubique

La matrice du laminé de rang infini à phase inclusionnaire vide est maintenant assumée comme cristalline à symétrie cubique et son comportement est caractérisé par w . La propriété d'homogénéité de degré $1 + 1/n$ de la fonction w permet de réécrire l'inégalité (4.11) comme

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}, t) \leq \min_{\mathbf{a}_\perp \in \mathcal{A}_\perp(\mathbf{0})} \int_0^t \left\langle w \left(\bar{\mathbf{D}}_d e^{-(t-\tau)} - 3\bar{\mathbf{D}}_m (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) \right) \right\rangle e^{(t-\tau)/n} d\tau. \quad (4.14)$$

Pour des taux de déformation purement sphériques ($\bar{\mathbf{D}}_d = \mathbf{0}$), l'argument de w ne dépend plus de τ . La propriété d'homogénéité de w réduit la dernière expression à

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}_m \mathbf{I}) \leq \min_{\mathbf{a}_\perp \in \mathcal{A}_\perp(\mathbf{0})} \langle w(\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) \rangle n (f^{-1/n} - 1) |3\bar{\mathbf{D}}_m|^{1+1/n}. \quad (4.15)$$

Le potentiel effectif de dissipation \tilde{w} prend une forme particulière pour un chargement hydrostatique. L'expression (2.25) conduit à une inégalité concernant la contrainte d'écoulement hydrostatique de sorte que

$$\bar{\sigma}_h \leq \alpha_{LAM}(n) n (f^{-1/n} - 1) \quad (4.16)$$

où

$$\alpha_{LAM}(n) = \frac{n+1}{n} \dot{\gamma}_0^{1/n} \min_{\mathbf{a}_\perp \in \mathcal{A}_\perp(\mathbf{0})} \langle w(\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) \rangle. \quad (4.17)$$

est un coefficient à évaluer numériquement. Cette constatation préliminaire concernant le point hydrostatique trouve son utilité dans la section suivante. On note aussi que si \mathbf{a}_\perp est choisi comme nul, le coefficient α_{LAM} correspond exactement au coefficient α_{HSA} . De ce fait, $\alpha_{LAM} \leq \alpha_{HSA}$ et la réponse d'un laminé de rang infini est moins rigide que celle de l'assemblage de sphères creuses sous chargement hydrostatique. La borne supérieure des laminés est plus resserrée que celle de l'assemblage de sphères creuses (du moins pour le point hydrostatique).

On cherche maintenant à borner l'expression (4.14) en restreignant l'ensemble des \mathbf{a}_\perp éligibles à l'optimalité. Le choix de borner l'expression (4.14) est motivé par l'envie de simplifier les estimations pour en faciliter l'utilisation. L'étude dans le chapitre 2 section 4 des modèles existants pour monocristaux poreux a mis en évidence qu'une attention particulière doit être accordée au chargement hydrostatique. L'idée consiste à borner (4.14) par une expression plus simple tout en ne perdant aucune information pour un chargement hydrostatique. La démarche adoptée consiste simplement à imposer $\mathbf{a}_\perp = \mathbf{a}_\perp^H$ où \mathbf{a}_\perp^H est la fonction minimisant l'expression (4.17) telle que

$$\mathbf{a}_\perp^H = \arg \min_{\mathbf{a}_\perp \in \mathcal{A}_\perp(\mathbf{0})} \langle w(\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) \rangle. \quad (4.18)$$

Donc,

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}, t) \leq \int_0^t \left\langle w \left(\bar{\mathbf{D}}_d - 3\bar{\mathbf{D}}_m e^{t-\tau} (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp^H \otimes_s \boldsymbol{\xi}) \right) \right\rangle e^{-(t-\tau)} d\tau. \quad (4.19)$$

La dernière inégalité correspond exactement à l'expression (4.14) pour des chargements purement hydrostatique et purement déviatorique, et majore l'expression (4.14) pour d'autres chargements. Si \mathbf{a}_\perp^H est choisi nul, l'estimation des laminés correspond à l'estimation de l'assemblage de sphères creuses. Dans la prochaine section,

une étude détaillée du point hydrostatique permet entre autre de déterminer des informations supplémentaires sur les caractéristiques de la borne.

Viscoplasticité

En viscoplasticité, le comportement de la matrice est caractérisé par le potentiel w dual au potentiel u de type loi puissance (2.8). La dernière expression devient

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}, t) \leq \int_0^t \sup_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{T}_d} \left\langle \boldsymbol{\sigma}_d \cdot (\bar{\mathbf{D}}_d - 3\bar{D}_m e^{t-\tau} (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp^H \otimes_s \boldsymbol{\xi})) - \sum_{k=1}^K \frac{\tau_0^{(k)} \dot{\gamma}_0}{n+1} \left| \frac{\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \right|^{n+1} \right\rangle e^{-(t-\tau)} d\tau \quad (4.20)$$

où

$$\mathbf{a}_\perp^H = \arg \min_{\mathbf{a}_\perp \in \mathcal{A}_\perp(\mathbf{0})} \sup_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{T}_d} \left\langle \boldsymbol{\sigma}_d \cdot (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) - \sum_{k=1}^K \frac{\tau_0^{(k)} \dot{\gamma}_0}{n+1} \left| \frac{\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \right|^{n+1} \right\rangle \quad (4.21)$$

est une fonction à évaluer numériquement après avoir suivi le raisonnement présenté dans l'annexe C section 3.

Viscosité linéaire

Dans le cas linéaire où $n = 1$, le potentiel de dissipation w prend la forme particulière décrite par l'expression (2.11). Par conséquent, l'expression (4.19) s'intègre selon τ et \mathbf{a}_\perp^H est une fonction à évaluer numériquement après avoir suivi le même raisonnement que celui présenté dans l'annexe C section 3.

Plasticité

En plasticité, lorsque $n \rightarrow \infty$, le potentiel w prend la forme définie par l'expression (2.13). L'expression (4.19) devient

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}, t) \leq \int_0^t \sup_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{P}} \langle \boldsymbol{\sigma}_d \cdot (\bar{\mathbf{D}}_d - 3\bar{D}_m e^{t-\tau} (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp^H \otimes_s \boldsymbol{\xi})) \rangle e^{-(t-\tau)} d\tau \quad (4.22)$$

où

$$\mathbf{a}_\perp^H = \arg \min_{\mathbf{a}_\perp \in \mathcal{A}_\perp(\mathbf{0})} \sup_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{P}} \langle \boldsymbol{\sigma}_d \cdot (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) \rangle \quad (4.23)$$

est une fonction à évaluer numériquement après avoir suivi le même raisonnement que celui présenté dans l'annexe C section 3.

5 Chargement hydrostatique

Ici, les développements sont basés directement sur l'équation de Hamilton-Jacobi, et non pas sur sa solution générale. Une démarche similaire a été menée dans Idiart (2008) et dans Jöessel *et al.* (2018) pour des matériaux poreux viscoplastiques isotropes. Les potentiels \tilde{w} et \tilde{w}_h héritent de l'homogénéité de degré $1 + 1/n$ et $-1/n$ en $\bar{\mathbf{D}}$ et $\dot{\gamma}_0$, respectivement. Ainsi, l'expression (2.25) peut être interprétée comme

$$\hat{w}_h(\bar{D}_m, \tau) = \frac{\dot{\gamma}_0 \hat{\sigma}_h(\tau)}{1 + 1/n} \left| \frac{3\bar{D}_m}{\dot{\gamma}_0} \right|^{1+1/n} \quad (4.24)$$

et sa dérivée comme

$$\partial_{\bar{D}_m} \hat{w}_h(\bar{D}_m, \tau) = 3\hat{\sigma}_h \left| \frac{3\bar{D}_m}{\dot{\gamma}_0} \right|^{1/n} \text{sign}(\bar{D}_m). \quad (4.25)$$

Par insertion de (4.24) dans (4.7), l'équation de Hamilton-Jacobi réduite (4.7) se résume à une équation différentielle ordinaire en $\hat{\sigma}_h(\tau)$ telle que

$$\partial_\tau \hat{\sigma}_h - \frac{1}{n} \hat{\sigma}_h - \alpha_{LAM}(n) = 0, \quad \hat{\sigma}_h(0) = 0 \quad (4.26)$$

où

$$\alpha_{LAM}(n) = \frac{1+n}{n} \gamma_0^{1/n} \inf_{\mathbf{a}_\perp \in \mathcal{A}_\perp(\boldsymbol{\xi})} \langle w(\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) \rangle, \quad (4.27)$$

dont la solution est

$$\hat{\sigma}_h(\tau) = \alpha_{LAM}(n)n \left(e^{\tau/n} - 1 \right). \quad (4.28)$$

À l'instant final t , pour la porosité désirée, la contrainte d'écoulement hydrostatique $\tilde{\sigma}_h = \tilde{\sigma}_h(-\ln f)$ peut s'écrire sous la forme

$$\tilde{\sigma}_h = \alpha_{LAM}(n)n \left(f^{-1/n} - 1 \right). \quad (4.29)$$

Cette solution, exacte pour un chargement hydrostatique, coïncide exactement avec la borne supérieure (4.16) obtenue à partir de la solution de l'équation de Hamilton-Jacobi. L'estimation des laminés (4.19) est donc exacte pour un chargement hydrostatique et est une borne supérieure pour d'autres chargements.

Viscoplasticité

En viscoplasticité, l'expression (4.27) devient

$$\alpha_{LAM}(n) = \frac{1+n}{n} \inf_{\mathbf{a}_\perp \in \mathcal{A}_\perp(\boldsymbol{\xi})} \sup_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{T}_d} \left\langle \boldsymbol{\sigma}_d \cdot (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) - \sum_{k=1}^K \frac{\tau_0^{(k)}}{n+1} \left| \frac{\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \right|^{n+1} \right\rangle. \quad (4.30)$$

La condition sur l'infimum des \mathbf{a}_\perp oblige $\boldsymbol{\sigma}_d \boldsymbol{\xi}$ à être parallèle à $\boldsymbol{\xi}$ (voir annexe C section 4). La condition $\boldsymbol{\sigma}_d \boldsymbol{\xi} \parallel \boldsymbol{\xi}$ implique

$$\alpha_{LAM}(n) = \frac{1+n}{n} \sup_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{T}_\parallel(\boldsymbol{\xi})} \left\langle \boldsymbol{\sigma}_d \cdot (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi}) - \sum_{k=1}^K \frac{\tau_0^{(k)}}{n+1} \left| \frac{\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \right|^{n+1} \right\rangle, \quad (4.31)$$

où $\mathcal{T}_\parallel(\boldsymbol{\xi}) = \{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{T}_d : \boldsymbol{\sigma}_d \boldsymbol{\xi} \parallel \boldsymbol{\xi}\}$ (voir annexe C section 4). Cette expression peut encore être simplifiée en évaluant la fonction objective en $\lambda \boldsymbol{\sigma}_d$ et en optimisant par rapport à λ . Il en résulte

$$\alpha_{LAM}(n) = \sup_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{T}_\parallel(\boldsymbol{\xi})} \left\langle \frac{|\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\sigma}_d \boldsymbol{\xi}|^{(n+1)/n}}{\left(\sum_{k=1}^K \tau_0^{(k)-n} \left| \boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)} \right|^{n+1} \right)^{1/n}} \right\rangle. \quad (4.32)$$

La fonction objective est alors homogène de degré zéro en $\boldsymbol{\sigma}_d$. Par conséquent, l'ensemble admissible peut être restreint à des tenseurs dont la norme est fixe.

Viscosité linéaire

Lorsque l'exposant de viscosité $n = 1$, l'estimation de la contrainte d'écoulement hydrostatique (4.29) devient

$$\tilde{\sigma}_h = \alpha_{LAM}(1) \frac{1-f}{f} \quad (4.33)$$

où

$$\alpha_{LAM}(1) = \frac{2}{15} \mathbb{K} \cdot \mathbb{L} - \left\langle \frac{A_{22}A_1^2 + A_{11}A_2^2 - 2A_{12}A_1A_2}{A_{11}A_{22} - A_{12}^2} \right\rangle \quad (4.34)$$

avec $A_{ij} = (\boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi}_i) \cdot \mathbb{L}(\boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi}_j)$, $A_i = (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi}) \cdot \mathbb{L}(\boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi}_i)$ et $\{\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, \boldsymbol{\xi}\}$ une base orthonormée dans \mathbb{R}^3 . Le second terme dans cette expression vient du fait que $\sigma_d \boldsymbol{\xi}$ soit parallèle à $\boldsymbol{\xi}$. Si le tenseur de viscosité \mathbb{L} est isotrope, ce terme disparaît et la prédiction basée sur les laminés et l'assemblage de sphères creuses sont identiques. Si le tenseur de viscosité \mathbb{L} est anisotrope, le second terme est négatif et $\alpha_{LAM}(1) < \alpha_{HSA}(1)$.

Plasticité

Lorsque l'exposant de viscosité $n \rightarrow \infty$, l'estimation de la contrainte d'écoulement hydrostatique (4.29) devient

$$\tilde{\sigma}_h = -\beta_{LAM} \ln f, \quad (4.35)$$

où

$$\beta_{LAM} = \lim_{n \rightarrow \infty} \alpha_{LAM}(n) = \sup_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{P}_{||}(\boldsymbol{\xi})} \langle \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\sigma}_d \boldsymbol{\xi} \rangle \quad (4.36)$$

avec $\mathcal{P}_{||}(\boldsymbol{\xi}) = \{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{P} : \boldsymbol{\sigma}_d \boldsymbol{\xi} \parallel \boldsymbol{\xi}\}$.

Déficience

Pour des cristaux déficients avec *moins de trois* systèmes de glissement linéairement indépendants, l'estimation (4.31) tend vers l'infini. En effet, soit $\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\mu}_2$ et $\boldsymbol{\mu}_3$ trois tenseurs déviatoriques linéairement indépendants et orthogonaux à tous les tenseurs de Schmid du cristal déficient et soit

$$\boldsymbol{\sigma}_d = \lambda \boldsymbol{\xi} \cdot [f_1(\boldsymbol{\xi})\boldsymbol{\mu}_1 + f_2(\boldsymbol{\xi})\boldsymbol{\mu}_2 + f_3(\boldsymbol{\xi})\boldsymbol{\mu}_3] \boldsymbol{\xi} [f_1(\boldsymbol{\xi})\boldsymbol{\mu}_1 + f_2(\boldsymbol{\xi})\boldsymbol{\mu}_2 + f_3(\boldsymbol{\xi})\boldsymbol{\mu}_3]. \quad (4.37)$$

Le fait que $\boldsymbol{\sigma}_d \boldsymbol{\xi} \parallel \boldsymbol{\xi}$ et donc que $\boldsymbol{\xi}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_d \boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\xi}_2 \cdot \boldsymbol{\sigma}_d \boldsymbol{\xi} = 0$, avec $\{\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, \boldsymbol{\xi}\}$ une base orthonormée de \mathbb{R}^3 pour un vecteur $\boldsymbol{\xi}$ donné, permet d'obtenir un système linéaire de deux équations à trois inconnues dont une solution particulière est

$$f_1(\boldsymbol{\xi}) = (\boldsymbol{\xi}_2 \cdot \boldsymbol{\mu}_2 \boldsymbol{\xi})(\boldsymbol{\xi}_1 \cdot \boldsymbol{\mu}_3 \boldsymbol{\xi}) - (\boldsymbol{\xi}_1 \cdot \boldsymbol{\mu}_2 \boldsymbol{\xi})(\boldsymbol{\xi}_2 \cdot \boldsymbol{\mu}_3 \boldsymbol{\xi}), \quad (4.38)$$

$$f_2(\boldsymbol{\xi}) = (\boldsymbol{\xi}_1 \cdot \boldsymbol{\mu}_1 \boldsymbol{\xi})(\boldsymbol{\xi}_2 \cdot \boldsymbol{\mu}_3 \boldsymbol{\xi}) - (\boldsymbol{\xi}_2 \cdot \boldsymbol{\mu}_1 \boldsymbol{\xi})(\boldsymbol{\xi}_1 \cdot \boldsymbol{\mu}_3 \boldsymbol{\xi}), \quad (4.39)$$

$$f_3(\boldsymbol{\xi}) = (\boldsymbol{\xi}_1 \cdot \boldsymbol{\mu}_2 \boldsymbol{\xi})(\boldsymbol{\xi}_2 \cdot \boldsymbol{\mu}_1 \boldsymbol{\xi}) - (\boldsymbol{\xi}_1 \cdot \boldsymbol{\mu}_1 \boldsymbol{\xi})(\boldsymbol{\xi}_2 \cdot \boldsymbol{\mu}_2 \boldsymbol{\xi}) \quad (4.40)$$

En restreignant l'ensemble admissible dans (4.31) à un sous domaine de tenseurs de forme (4.37), $\alpha_{LAM}(n)$ peut être borné par

$$\alpha_{LAM}(n) \geq \frac{n+1}{n} \sup_{\lambda \in \mathbb{R}} \lambda \left\langle (\boldsymbol{\xi} \cdot [f_1(\boldsymbol{\xi})\boldsymbol{\mu}_1 + f_2(\boldsymbol{\xi})\boldsymbol{\mu}_2 + f_3(\boldsymbol{\xi})\boldsymbol{\mu}_3] \boldsymbol{\xi})^2 \right\rangle. \quad (4.41)$$

La moyenne sur la sphère unité est strictement positive et le supremum sur λ est non borné, donc

$$\alpha_{LAM}(n) = +\infty. \quad (4.42)$$

Ainsi, l'estimation (4.31) basée sur les laminés de rang infini prédit que tout monocristal poreux déficient avec moins de trois systèmes de glissement linéairement indépendants est rigide sous chargement hydrostatique.

Cette analyse ne s'applique pas aux cristaux défectueux avec trois ou quatre systèmes de glissement linéairement indépendants. Dans ces cas, il y a moins de trois tenseurs déviatoriques qui sont orthogonaux à tous les tenseurs de Schmid des cristaux défectueux linéairement indépendants et un sous-ensemble de tenseurs analogue à (4.37) ne peut pas être construit. Le modèle des laminés de rang infini et celui de l'assemblage de sphères creuses ne conduisent pas aux mêmes prédictions pour des monocristaux défectueux.

6 Conclusion

Les développements proposés sur les laminés de rang infini à matrice cristalline conduisent à une estimation pour monocristaux poreux en viscoplasticité. Il a été montré que cette estimation est exacte pour un chargement hydrostatique, dans le sens où ce n'est pas une borne. De manière générale, les laminés séquencés sont plus souples que l'assemblage de sphères creuses. Plus précisément, le point hydrostatique est plus resserré que celui fourni par l'assemblage de sphères creuses (approche HSA). D'un autre côté, les laminés prédisent exactement la même réponse que l'assemblage de sphères creuses (approche HSA) pour le point déviatorique (borne de Voigt). Le coût numérique pour évaluer le potentiel de dissipation du laminé est moindre que pour l'approche HSA, mais plus élevé que pour l'approche HSA+.

Chapitre 5

Monocristal poreux idéalisé comme une microstructure périodique

Le monocristal poreux est maintenant idéalisé comme un milieu périodique dont le motif élémentaire (la cellule unitaire) est cubique et contient des cavités distribuées aléatoirement. Ce chapitre présente la démarche permettant de générer de telles microstructures. Le chapitre présente ensuite l'algorithme basé sur la transformée de Fourier rapide, permettant de déterminer la réponse macroscopique de ces microstructures, ainsi que la méthode utilisée pour estimer la réponse locale. Enfin, des simulations numériques préliminaires permettent de choisir des cellules unitaires représentatives du monocristal poreux.

Sommaire

1	Introduction	57
2	Génération de microstructures	57
3	Méthode Fast Fourier Transform	59
4	Réponse locale de la microstructure	60
5	Discrétisation et microstructures	60
6	Conclusion	62

1 Introduction

Le monocristal poreux est idéalisé comme une cellule unitaire périodique contenant des cavités distribuées aléatoirement. Les champs mécaniques dans la cellule unitaire sont évalués numériquement par un algorithme basé sur la transformée de Fourier rapide (algorithme FFT) proposé par [Moulinec et Suquet \(1994\)](#). La méthode FFT exploite directement l'image d'une microstructure et est particulièrement bien adaptée à l'étude de matériaux à réponse fortement non linéaire, dans lesquels les champs mécaniques peuvent être très localisés (voir par exemple les travaux de [Idiart *et al.* \(2006, 2009\)](#) et de [Grennerat *et al.* \(2012\)](#)). Les résultats obtenus par cette méthode numérique servent de référence pour évaluer la précision des autres approches développées dans les chapitres précédents.

2 Génération de microstructures

On considère des cellules unitaires ainsi bien avec une unique cavité au centre qu'avec de multiples cavités distribuées aléatoirement dans le but de mettre en évidence la sensibilité des propriétés effectives pour une distribution donnée. Les cellules unitaires contenant de multiples cavités sont générées suivant une procédure similaire à ([Vincent *et al.*, 2014](#)). Premièrement, une cellule unitaire cubique, dont les cotés sont de taille L , est remplie avec N sphères suivant un processus aléatoire contraint par une condition de non-recouvrement. Toutes les sphères ont le même rayon R et occupent une fraction volumique de 0.35. Cette fraction volumique est choisie arbitrairement. Deuxièmement, des cavités sphériques d'un rayon r sont introduites au centre de chaque sphère. Chaque cavité et sa coque de matrice constituent un motif élémentaire. La porosité est définie par $f = (4/3)\pi(r/L)^3N$. Le rayon des cavités r est fixé pour obtenir la porosité désirée, sachant que le nombre de sphères N doit être suffisamment raisonnable pour garantir une distribution quasi-isotrope. Les choix du rayon r et du nombre de cavités N sera discuté par la suite. Comme énoncé plus haut, la fraction volumique des motifs élémentaires est fixée arbitrairement à 0.35. Cette fraction volumique est proche de la fraction volumique maximale de sphères que peut distribuer aléatoirement l'algorithme RSA (Random Sequential Addition), utilisé ici pour distribuer aléatoirement les sphères dans la cellule unitaire. Choisir une trop petite fraction autoriserait la formation d'amas, et inversement, choisir une trop grande fraction contraindrait les cavités à former un empilement compact. Toutes les microstructures utilisées dans ce travail ont été générées par ce procédé (excepté la microstructure présentant une unique cavité en son centre). Elles sont toutes présentées sur les figures [5.1](#) et [5.2](#).

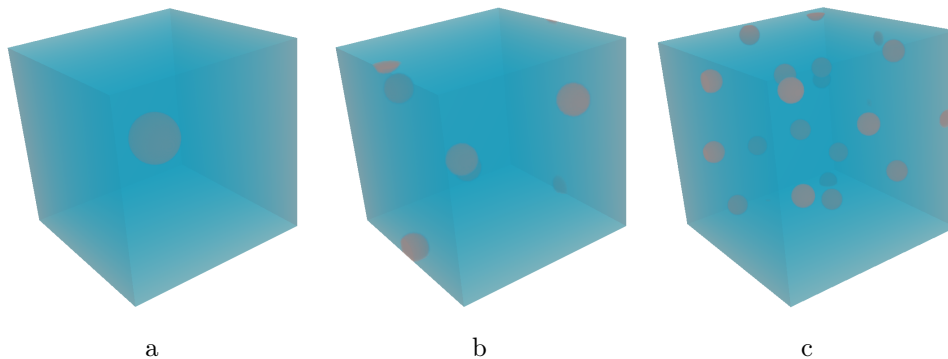


FIGURE 5.1 – Cellules unitaires périodiques représentatives de monocristaux de porosité $f = 0.01$. a : Une unique cavité placée au centre. b : 5 cavités sont distribuées aléatoirement et ont chacune un rayon de 0.08. c : 17 cavités sont distribuées aléatoirement et ont chacune un rayon de 0.05.

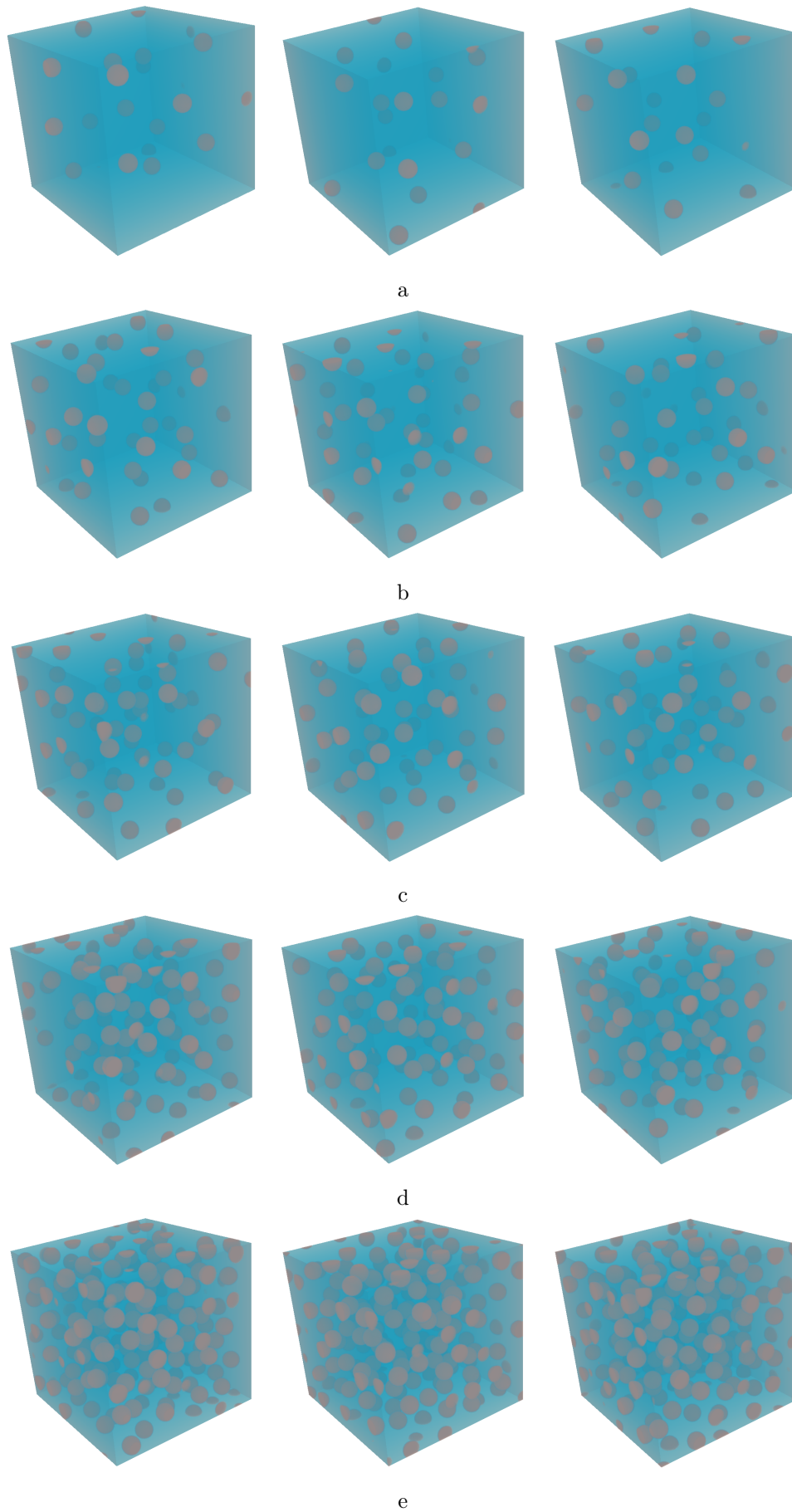


FIGURE 5.2 – Cellules unitaires périodiques représentatives de monocristaux poreux où les cavités sont distribuées aléatoirement et ont chacune un rayon de 0.05. Le nombre de cavités est réglé afin d’obtenir la porosité désirée. Pour chaque porosité f , trois microstructures différentes sont générées. a : $f = 0.01$. b : $f = 0.02$. c : $f = 0.03$. d : $f = 0.05$. e : $f = 0.1$.

Les cellules unitaires générées devront par la suite être discrétisées en une grille régulière de voxels pour pouvoir être traitées par l'algorithme FFT. Une loi de comportement est assignée à chaque voxel, selon sa position dans la cellule unitaire. Dans la matrice, la loi de comportement dérive du potentiel en contrainte u de type loi puissance (2.8) et dans les cavités, la loi de comportement dérive d'un potentiel en contrainte égal à la fonction indicatrice de l'ensemble des tenseurs nuls (contraintes nulles dans les cavités).

3 Méthode Fast Fourier Transform

Les champs mécaniques dans la cellule unitaire sont évalués par un algorithme FFT originellement proposé par [Moulinec et Suquet \(1994\)](#) et implémenté dans le code de calcul CraFT (Crystal and Fourier Transform) suivant la démarche de [Suquet *et al.* \(2012\)](#). À chaque pas d'intégration en temps, les champs mécaniques sont déterminés par un algorithme de point fixe qui intègre l'algorithme FFT. Cet algorithme résout

$$\begin{cases} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, & \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C} \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^{vp}), & \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} = \mathbf{D}^{vp} = \partial_{\boldsymbol{\sigma}} u(\mathbf{x}, \boldsymbol{\sigma}), & \boldsymbol{\varepsilon} = \nabla \otimes_s \mathbf{u} & \text{dans } \Omega_{\#} \\ \mathbf{u} = \bar{\mathbf{D}}\mathbf{x} + \mathbf{u}_{\#} & \text{sur } \partial\Omega_{\#} \end{cases} \quad (5.1)$$

via le problème auxiliaire

$$\begin{cases} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, & \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}^{(0)} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\tau}, & \boldsymbol{\varepsilon} = \nabla \otimes_s \mathbf{u} & \text{dans } \Omega_{\#} \\ \mathbf{u} = \bar{\mathbf{D}}\mathbf{x} + \mathbf{u}_{\#} & \text{sur } \partial\Omega_{\#} \end{cases} \quad (5.2)$$

où le milieu hétérogène a été ramené à un milieu homogène et linéaire (au comportement décrit par le tenseur $\mathbb{C}^{(0)}$) soumis à un champ de polarisation $\boldsymbol{\tau} = \mathbb{C} \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^{vp}) - \mathbb{C}^{(0)} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}$. Pour rappel, $\boldsymbol{\varepsilon}$ est le tenseur des déformations. Le tenseur d'élasticité \mathbb{C} peut être arbitrairement choisi puisqu'on s'intéresse à la réponse de la cellule unitaire lorsque les déformations élastiques sont négligeables devant les déformations de nature viscoplastique. Les conditions aux limites sont périodiques sur la frontière du domaine $\Omega_{\#}$ de la cellule unitaire pour un champ de vitesse $\mathbf{u}_{\#}$. La solution du problème est connue et dépend de la fonction de Green $\boldsymbol{\Gamma}^{(0)}$, explicitement connue dans l'espace de Fourier. Les propriétés de la fonction de Green permettent de déterminer le champ solution $\boldsymbol{\varepsilon}$ par un algorithme de point fixe

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{k+1} = \boldsymbol{\varepsilon}_k - \boldsymbol{\Gamma}^{(0)} * \boldsymbol{\sigma}_k \quad (5.3)$$

où

$$\boldsymbol{\sigma}_k = \mathbb{C} \cdot (\boldsymbol{\varepsilon}_k - \boldsymbol{\varepsilon}_k^{vp}) \quad (5.4)$$

à l'itération k . On note que c'est le schéma dit « basique » qui est utilisé dans ce travail. L'algorithme est résumé par [Moulinec et Suquet \(1998\)](#). À l'itération 0, $\boldsymbol{\varepsilon}_0$ est extrapolé à partir des champs de déformation solutions des deux pas de temps précédents comme dans ([Suquet *et al.*, 2012](#)).

Condition de chargement

Normalement, le procédé itératif permet d'imposer une déformation macroscopique à une valeur donnée. Néanmoins, il est possible d'imposer la direction de la contrainte macroscopique via un schéma itératif secondaire qui propose, à chaque itération, une nouvelle déformation macroscopique. Ainsi, il doit être vérifié, à chaque itération, si les conditions de chargement prescrites ont été atteintes ou non. Le schéma itératif est défini comme $[\mathbb{C}^{(0)}]^{-1} \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{k+1} - k_{k+1} \bar{\boldsymbol{\sigma}}_0 = [\mathbb{C}^{(0)}]^{-1} \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_k - \langle \boldsymbol{\sigma}_k \rangle_{\Omega_{\#}}$ avec $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{k+1} \cdot \bar{\boldsymbol{\sigma}}_0 = \bar{\varepsilon}(t)$ où $\bar{\boldsymbol{\sigma}}_0$ est la direction de contrainte imposée,

$\bar{\varepsilon}(t)$ sert de paramètre de chargement imposé et est la « déformation macroscopique imposée » dans la direction $\bar{\sigma}_0$ (c'est un scalaire), $\langle \sigma_k \rangle_{\Omega_{\#}}$ est la moyenne du champ de contrainte à l'itération k et enfin, k_{k+1} est un scalaire à évaluer. La convergence du schéma itératif secondaire est vérifiée quand $\|k_k \bar{\sigma}_0 - \langle \sigma_k \rangle_{\Omega_{\#}}\| / \|k_k \bar{\sigma}_0\| < 10^{-4}$ (voir la documentation de CraFT, en libre téléchargement sur <http://craft.lma.cnrs-mrs.fr>).

Critère de convergence

Deux tests définissent la convergence de l'algorithme : un test sur les conditions de chargement (évoqué plus haut) et un test d'équilibre. La convergence est atteinte lorsque l'équilibre sur σ_{k+1} est vérifié tel que $\|\text{div}\sigma\| < 10^{-2}$. La norme 2 de la divergence du champ de contrainte est calculée dans l'espace de Fourier comme $\|\text{div}\sigma\| = \sqrt{\sum_{\varphi} |\varphi \cdot \hat{\sigma}(\varphi)|^2}$ où ici, φ est une « fréquence ».

4 Réponse locale de la microstructure

Sous ces conditions, les deuxième et troisième équations de l'expression (5.1) sont intégrées en temps, sans provoquer l'évolution de la microstructure, jusqu'à ce que les taux de déformation élastiques deviennent négligeables et que les champs mécaniques approchent ceux d'un problème purement viscoplastique. Dans le cristal, le modèle de comportement de type loi puissance dérive de l'expression (2.8) et des deuxième et troisième équations de l'expression (5.1). Il se résume au système d'équations $\dot{\mathbf{Y}} = F(\mathbf{D}, \mathbf{Y})$ qu'on choisit d'intégrer ici par la méthode numérique explicite de Runge-Kutta (3)2 FSAL. Ici, $\mathbf{Y} = \sigma$ et la fonction F correspond à l'expression (D.1).

Pour un incrément de temps donné, \mathbf{Y} est mis à jour par la méthode de Runge-Kutta d'ordre 3, puis par la méthode de Runge-Kutta d'ordre 2. Les deux estimations sont comparées, si elles sont suffisamment proches, l'estimation obtenue par la méthode Runge-Kutta d'ordre 3 est retenue, si elles sont trop éloignées, l'incrément de temps est diminué et le même protocole est réitéré. La propriété FSAL (First Same As Last) de la méthode Runge-Kutta 3(2) décomplexifie l'algorithme (en terme de nombre d'opérations à effectuer) car certains termes à évaluer sont équivalents d'une itération à l'autre. L'algorithme de Runge-Kutta(3)2 FSAL est présenté en détails dans l'annexe D section 2.

5 Discrétisation et microstructures

Une étude de sensibilité est entreprise pour déterminer l'influence de la dispersion des cavités et de la discrétisation des cellules unitaires sur les résultats. Le principal paramètre influençant la convergence des résultats FFT est le nombre de voxels décrivant chaque cavité. Pour choisir le nombre de voxels par cavité, des simulations FFT ont été menées pour différents degrés de discrétisation (32^3 , 64^3 , 128^3 et 256^3) sur des cristaux fcc (où $\tau_0^{(k)} = \tau_0 \forall k$) avec une porosité $f = 0.01$, un exposant de viscosité $n = 10$ et une cellule unitaire contenant une seule cavité au centre. Les différents degrés de discrétisation de la cellule unitaire contenant une seule cavité au centre sont montrés sur la figure 5.3.

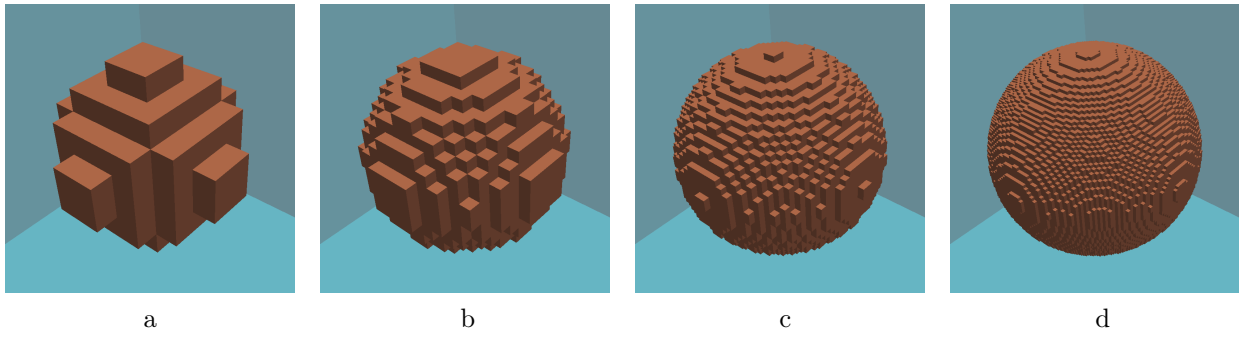


FIGURE 5.3 – Coupes de cellules unitaires avec une cavité au centre telle que la porosité $f = 0.01$. a : Cellule discrétisée par 32^3 voxels. b : Cellule discrétisée par 64^3 voxels. c : Cellule discrétisée par 128^3 voxels. d : Cellule discrétisée par 256^3 voxels.

Pour caractériser la réponse hydrostatique du monocristal au comportement viscoplastique, la direction des contraintes macroscopiques est fixée comme purement sphérique. La partie sphérique des taux de déformations macroscopiques est fixé constant $\bar{D}_m > 0$. Ainsi, la contrainte macroscopique hydrostatique $\bar{\sigma}_m$ sur la cellule unitaire est calculée et la contrainte d'écoulement hydrostatique est finalement obtenue depuis la relation

$$\bar{\sigma}_h = \bar{\sigma}_m \left| \frac{\dot{\gamma}_0}{3\bar{D}_m} \right|^{1/n}, \quad (5.5)$$

qui découle de (2.24) et (2.25). Les simulations présentées par la suite ont été réalisées en fixant $\bar{D}_m = 1/9000 \text{ s}^{-1}$, $\dot{\gamma}_0 = 1 \text{ s}^{-1}$ et en utilisant les coefficients de \mathbb{C} relatifs à un acier austénitique. Il est rappelé que la contrainte d'écoulement hydrostatique calculée est indépendante de ces paramètres. La figure 5.4 montre la contrainte d'écoulement hydrostatique en fonction du nombre de voxels. On note que c'est cette contrainte d'écoulement hydrostatique qui sert de grandeur d'intérêt (sortie des calculs) pour l'étude de discrétisation et de microstructures.

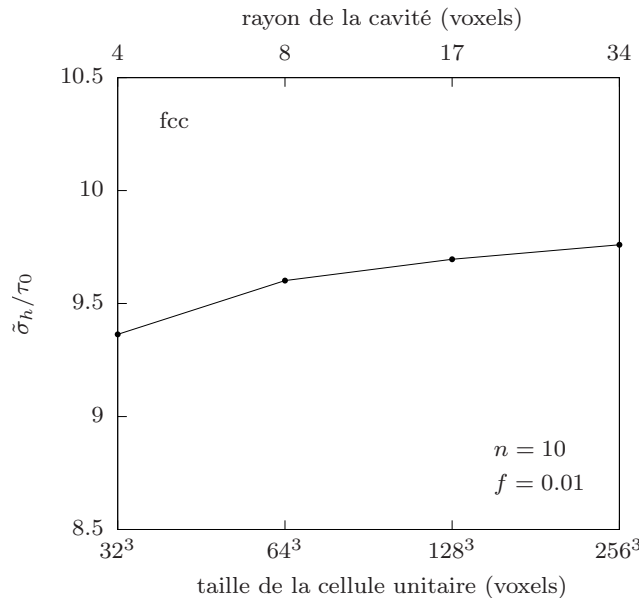


FIGURE 5.4 – Étude de convergence au nombre de voxels sur des des monocristaux fcc de porosité $f = 0.01$ avec une cavité au centre pour un exposant $n = 10$. Contrainte d'écoulement hydrostatique $\bar{\sigma}_h$ normalisée par τ_0 en fonction de la discrétisation de la cellule unitaire.

Les résultats suggèrent qu'une discrétisation garantissant au moins un rayon de 13 voxels par cavité fournit un compromis raisonnable entre précision et performance numérique. Par conséquent, les cellules unitaires à

multiples cavités seront discrétisées avec 256^3 voxels et le rayon des cavités sera fixé à $r = 0.05L$ de sorte à satisfaire le critère précédent.

Les contraintes d'écoulement hydrostatique de trois cellules unitaires (voir figure 5.2 a) où les cavités sont disposées aléatoirement sont reportées dans le tableau 5.1. Le tableau présente aussi la valeur qui aurait été obtenue avec une cellule unitaire contenant une unique cavité au centre avec un rayon de 13 voxels, qui sont obtenus par interpolation des valeurs de la figure 5.4.

Tirage 1	Tirage 2	Tirage 3	Une cavité au centre
9.701	9.674	9.667	9.649

TABLE 5.1 – Contraintes d'écoulement hydrostatique $\tilde{\sigma}_h$ normalisés par τ_0 de monocristaux fcc périodiques à différentes géométries où $\tau_0^{(k)} = \tau_0 \forall k$, $f = 0.01$ et $n = 10$. Les valeurs pour les géométries aléatoires correspondent à 256^3 voxels, tandis que la valeur pour l'unique cavité au centre a été obtenue par interpolation, de sorte que toutes les valeurs correspondent à une discrétisation de 13 voxels par rayon de cavité.

Les quatre valeurs sont très similaires : la différence relative n'excède pas 1%. Ainsi, la contrainte d'écoulement hydrostatique semble peu sensible à l'agencement des cavités, en tout cas pour des distributions "monodispersées" (à taille unique) avec des porosités faibles, du moins pour des cristaux cubiques à faces centrées faiblement anisotropes ($\tau_0^{(k)} = \tau_0 \forall k$) où $n = 10$.

6 Conclusion

Les microstructures périodiques où les cavités sphériques sont réparties aléatoirement, de sorte à approcher au mieux une distribution isotrope des cavités, avec une discrétisation adaptée au problème (256^3 voxels) permettent d'estimer la réponse effective de monocristaux poreux avec le code de calcul CraFT, où le comportement cristallin dérivant du potentiel de type loi puissance a été implémenté. Les simulations numériques servent de référence et peuvent permettre d'évaluer la performance des estimations issues de l'assemblage de sphères creuses et des laminés de rang infinis présentées dans les chapitres précédents. La contrainte d'écoulement hydrostatique sert de grandeur d'intérêt pour l'étude de discrétisation et de microstructures où un chargement purement hydrostatique est imposé sur des cellules poreuses à matrice fcc. L'étude de convergence au voxel, permettant de déterminer quel degré de discrétisation des microstructures est acceptable, a été menée pour un fort exposant de viscosité ($n = 10$), connu pour accentuer la localisation des champs mécaniques dans la microstructure. Il a aussi été montré que la distribution des cavités a peu d'effet sur la réponse de la microstructure pour les paramètres géométriques et les paramètres de discrétisation choisis. On considère par la suite que les cellules générées (et présentées sur la figure 5.2) ne vont pas engendrer d'anisotropie supplémentaire importante due à l'agencement des cavités.

Chapitre 6

Résultats

Ce chapitre est dédié à la comparaison des différentes approches développées plus haut. Les estimations obtenues avec la sphère creuse, les laminés et les simulations numériques sont comparées pour les cas d'un chargement purement hydrostatique et d'un chargement axisymétrique quelconque, ce pour plusieurs porosités et différents cristaux cubiques, en viscosité linéaire, en viscoplasticité ou en plasticité. Les estimations sont comparées tant que possible avec les résultats de la littérature.

Sommaire

1	Introduction	64
2	Chargement hydrostatique	64
3	Chargement axisymétrique	70
4	Conclusion	76

1 Introduction

Les approches développées dans les chapitres précédents sont employées ici pour estimer le comportement de monocristaux poreux pour trois types de cristaux :

- Les cristaux cubiques à faces centrées (fcc pour face-centered cubic) qui se déforment plastiquement le long d'un ensemble de quatre plans de glissements de type $\{111\}$ dans trois directions de glissement par plan de type $\langle 110 \rangle$ et qui constituent un ensemble de douze systèmes de glissement ($K = 12$).
- Les cristaux cubiques centrés (bcc pour body-centered cubic) qui se déforment plastiquement dans les directions $\langle 111 \rangle$ des plans de type $\{110\}$ et $\{112\}$ et qui constituent un ensemble de vingt-quatre systèmes de glissements ($K = 24$).
- Les cristaux ioniques (ionic) qui se déforment plastiquement selon trois familles différentes de systèmes de glissement : $\{110\}\langle 110 \rangle$, $\{100\}\langle 110 \rangle$ et $\{111\}\langle 110 \rangle$. Les familles seront respectivement nommées familles A , B et C . La famille A est constituée de six systèmes de glissement où deux d'entre eux sont linéairement indépendants et peuvent seulement s'accommoder aux composantes normales des taux de déformations. La famille B est constituée de six systèmes de glissement où trois d'entre eux sont linéairement indépendants et peuvent seulement s'accommoder aux composantes de cisaillement des taux de déformations. À cause de l'orthogonalité des systèmes des familles A et B , les deux familles réunies fournissent cinq systèmes de glissement indépendants et donc une déformation isochore peut être envisagée. Enfin, la famille C est composée des douze mêmes systèmes de glissement des cristaux fcc. Ainsi, les trois familles réunies totalisent vingt-quatre systèmes de glissement ($K = 24$).

Les tables de l'annexe A section 2 répertorient les caractéristiques de chaque système de glissement pour les trois types de cristaux à symétrie cubique. Les mailles élémentaires sont schématisées sur la figure 6.1.

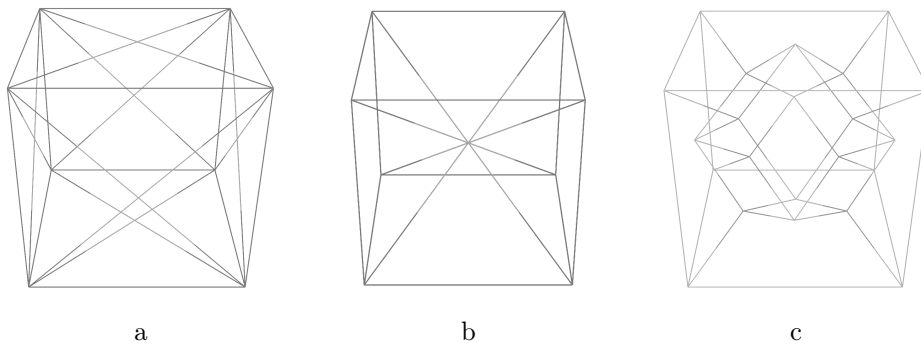


FIGURE 6.1 – Mailles élémentaires. a : Cubique à faces centrées. b : Cubique centré. c : Ionique

2 Chargement hydrostatique

Les approches HSA et LAM sont comparées à des simulations FFT pour le cas d'un chargement purement hydrostatique. Pour les approches HSA et LAM, le taux de déformations imposé est purement hydrostatique de sorte que $\bar{\mathbf{D}} = \bar{D}_m \mathbf{I}$ ($\bar{D}_{eq} = 0$ et la triaxialité $X_{\bar{\mathbf{D}}} = \bar{D}_m / \bar{D}_{eq}$ tend vers l'infini). Pour les simulations FFT, la direction de contrainte est imposée comme purement hydrostatique de sorte que $\bar{\boldsymbol{\sigma}}_0 = \bar{\sigma}_{0m} \mathbf{I}$. Les différentes approches sont comparées pour des porosités comprises entre 0.01 et 0.1 et des exposants n compris entre 1 et

10. Les deux approches sont aussi comparées aux critères de plasticité de Han (2012) et Paux *et al.* (2015) pour le cas où $n \rightarrow \infty$.

Cristaux faiblement anisotropes

Les cristaux cubique à faces centrée, cubique centré et ionique étudiés ici ont des cisssions de référence identiques $\tau_0^{(k)} = \tau_0$ pour tous les systèmes de glissement k . De ce fait, tous ces cristaux ont une relativement faible anisotropie plastique.

Les différentes estimations développées dans les chapitres précédents sont tout d'abord comparées via les coefficients $\alpha_{HSA}(n)$ et $\alpha_{LAM}(n)$ associés à l'assemblage de sphères creuses et aux laminés séquencés. Le tableau 6.1 rapporte les valeurs numériques de ces coefficients pour quelques valeurs précises de l'exposant n tandis que la figure 6.2 présente les courbes pour l'ensemble des n entre 1 et $\rightarrow \infty$. Les détails sur les différentes techniques employées pour évaluer numériquement ces coefficients sont présentés dans l'annexe D section 4.

	fcc		bcc		ionic	
	α_{HSA}	α_{LAM}	α_{HSA}	α_{LAM}	α_{HSA}	α_{LAM}
$n = 1$	0.733	0.651	0.367	0.321	0.316	0.298
$n = 2$	1.266	1.165	0.898	0.815	0.767	0.746
$n = 3$	1.500	1.397	1.191	1.093	1.011	0.990
$n = 5$	1.700	1.597	1.468	1.357	1.239	1.215
$n = 10$	1.859	1.743	1.685	1.557	1.418	1.386
$n = 15$	1.916	1.789	1.751	1.655	1.479	1.438
$n \rightarrow \infty$	2.038	1.864	1.859	1.736	1.604	1.525

TABLE 6.1 – Coefficients α_{HSA} et α_{LAM} normalisés par τ_0 pour des cristaux faiblement anisotropes avec différents exposants n .

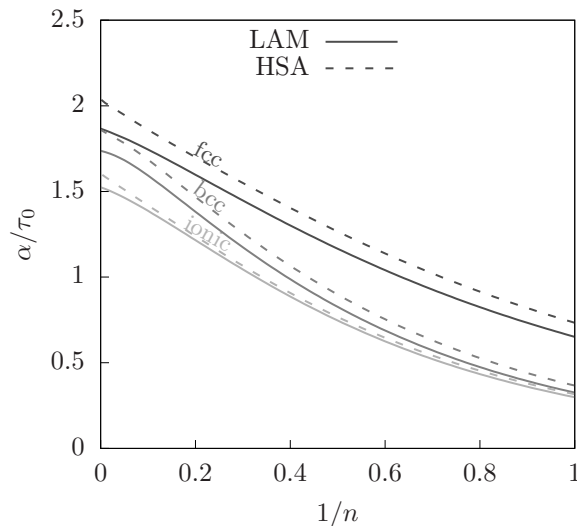


FIGURE 6.2 – Coefficients α pour des cristaux faiblement anisotropes où $\tau_0^{(k)} = \tau_0 \forall k$ pour des cristaux cubiques à faces centrées, cubiques centrés et ioniques.

Comme anticipé dans les deux chapitres précédents, les laminés séquencés sont toujours plus souples que l'assemblage de sphères creuse. Les différences ne sont pourtant pas substantielles entre les estimations LAM

et HSA : elles sont de l'ordre de 10% dans la plupart des cas et n'excèdent pas 15%. Dans le cas de cristaux parfaitement plastiques, les deux estimations prédisent des coefficients compris entre $3/2$ et 2 pour les trois géométries cristallines. Il est souligné que les estimations LAM et HSA ne coïncident pas même pour $n = 1$.

Pour les simulations FFT, les trois tirages des cellules unitaires (voir figure 5.2), toujours discrétisés par 256^3 voxels, sont utilisés pour les porosités $f = 0.01, 0.02, 0.03, 0.05, 0.1$ et les exposants $n = 1, 3, 5, 10$ sur les fcc. Seuls les premiers tirages (voir figure 5.2), toujours discrétisés par 256^3 voxels, sont utilisés pour les porosités $f = 0.01, 0.02, 0.03, 0.05, 0.1$ et les exposants $n = 1, 3, 5, 10$ sur les bcc et les ioniques.

Les estimations et les simulations numériques en champs complets sont comparées dans la figure 6.3 aux simulations par élément finis de Han *et al.* (2013) et de Mbiakop *et al.* (2015) ainsi qu'à l'estimation de Paux *et al.* (2015) (dont les coefficients sont trouvés dans (Paux, 2017)). Les courbes présentent la contrainte d'écoulement hydrostatique exprimée en fonction de l'exposant de viscosité et de la porosité pour les cristaux cubiques à faces centrées. Les simulations numériques de Han *et al.* (2013) et de Mbiakop *et al.* (2015) ont été réalisées sur des microstructures avec une unique cavité au centre ou plusieurs cavités réparties aléatoirement (respectivement). Ces résultats sont totalement cohérents avec les approches HSA et LAM pour des porosités comprises entre $f = 0.01$ et $f = 0.05$ (voir figure 6.3.a), ce qui confirme la faible sensibilité de la contrainte d'écoulement hydrostatique à la dispersion des cavités. Les simulations FFT et les simulations par éléments finis sont cohérents avec les approches HSA et LAM pour les cas limites linéaire visqueux où $n = 1$ et parfaitement plastique où $n \rightarrow \infty$ (voir figure 6.3.b). L'estimation de Paux *et al.* (2015) (cas où $n \rightarrow \infty$), lorsqu'elle est privée du coefficient empirique dont la signification est expliquée dans (Tvergaard, 1982), correspond exactement à l'estimation HSA.

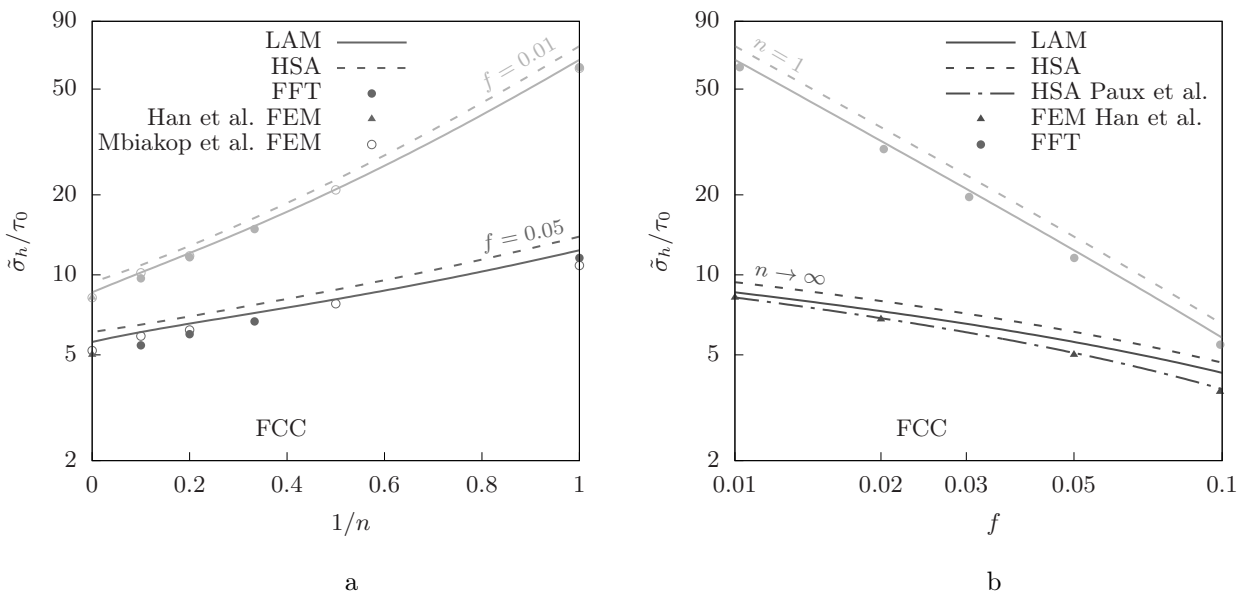


FIGURE 6.3 – Prédiction de la contrainte d'écoulement hydrostatique pour des cristaux cubiques à faces centrées faiblement anisotropes, normalisée par τ_0 , comme fonction de la porosité f et de l'exposant n . Comparaison avec les simulations par éléments finis de Han *et al.* (2013) et de Mbiakop *et al.* (2015). Lorsque $n \rightarrow \infty$, comparaison avec l'estimation de Paux *et al.* (2015) (non privée du coefficient de type (Tvergaard, 1982), l'ensemble des coefficients sont trouvés dans (Paux, 2017)).

Les estimations et les simulations numériques en champs complets sont comparées dans la figure 6.4 cette fois-ci pour les trois types de cristaux. Les courbes présentent la contrainte d'écoulement hydrostatique exprimée en fonction de l'exposant de viscosité et de la porosité.

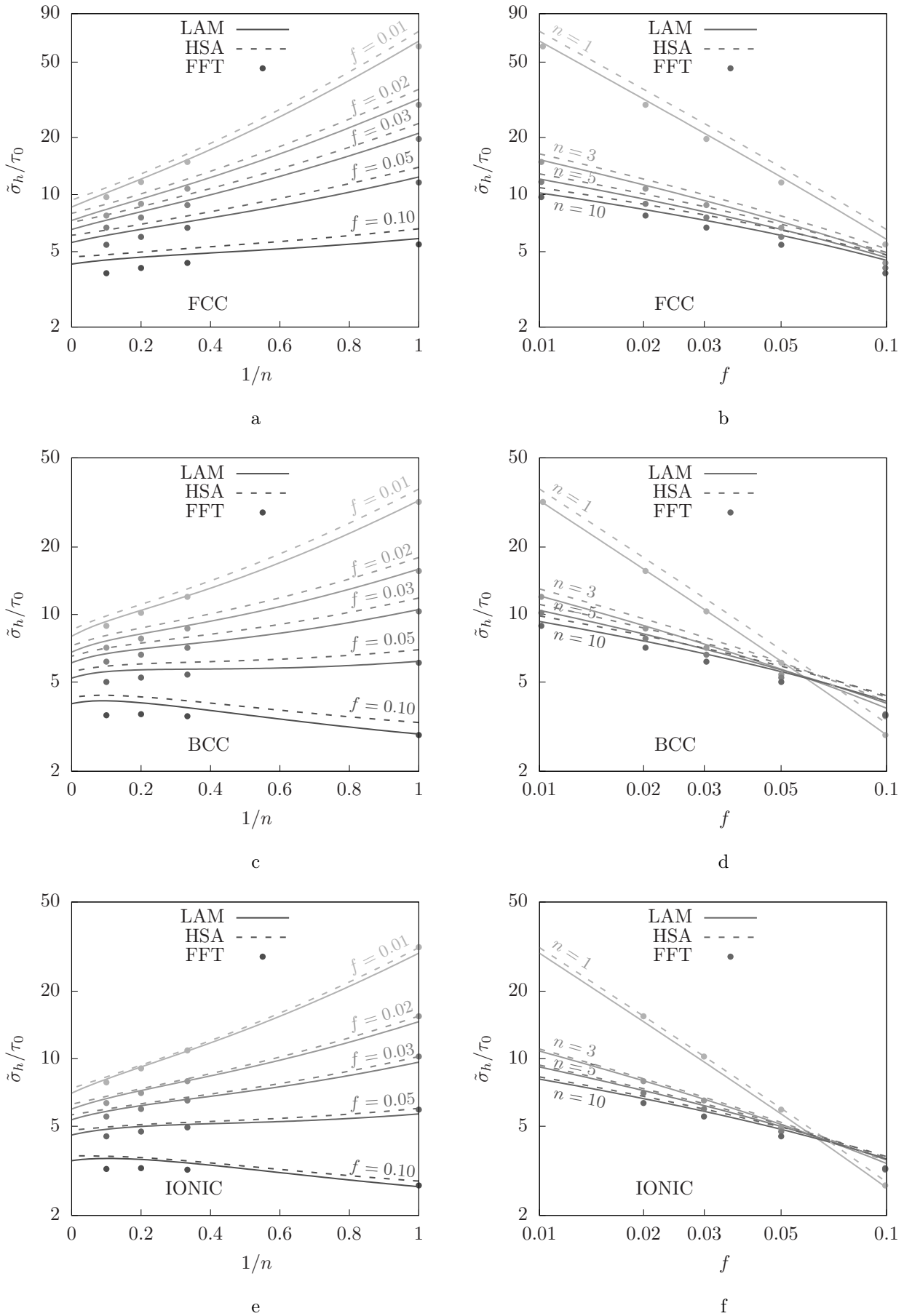


FIGURE 6.4 – Prédiction de la contrainte d'écoulement hydrostatique pour des cristaux faiblement anisotropes, normalisée par τ_0 , comme fonction de la porosité f et de l'exposant n . a et b : cristaux cubiques à faces centrées. c et d : cristaux cubiques centrés. e et f : cristaux ioniques.

Les estimations sont en accord avec les simulations pour tous les paramètres considérés. Aussi, les simulations confirment la tendance $\tilde{\sigma}_h \sim n(f^{-1/n} - 1)$ prédites par les estimations. C'est la même tendance que les estimations de type Gurson pour des matériaux poreux à matrice de von Mises. Les laminés séquencés considérés dans ce travail atteignent la borne supérieure linéaire de Hashin et Shtrikman (Idiart, 2008), qui constitue une borne supérieure rigoureuse de la contrainte d'écoulement hydrostatique pour tous cristaux ayant une distribution isotrope des cavités et un exposant $n = 1$. Les estimations basées sur l'assemblage de sphères creuses violent donc cette borne.

Les estimations sont laissées en l'état et ne sont pas ajustées (du moins pour le moment) par un coefficient de type (Tvergaard, 1982), contrairement à Han *et al.* (2013) et Paux *et al.* (2015). En viscoplasticité, les estimations de la contrainte d'écoulement hydrostatique dépendent de la porosité comme $\tilde{\sigma}_h \sim n(f^{-1/n} - 1)$ et doivent être valables pour tout type de viscosité, ce qui empêche toute modification de type (Tvergaard, 1982) où un unique coefficient ne peut ajuster les estimations pour un exposant n quelconque.

Cristaux fortement anisotropes

Les cristaux étudiés ici ont une forte anisotropie plastique. En particulier, on considère des cristaux ioniques se déformant par glissement le long des familles A et B seulement. Les cisssions de référence de chaque famille sont notées τ_0^A et τ_0^B .

Pour les simulations FFT, la cellule unitaire présentée dans la figure 5.1.b, discrétisée par 128^3 voxels pour gagner en temps de calcul, est utilisée ici pour la porosité $f = 0.01$, les exposants $n = 1, 3, 5, 10$ et les contrastes $\tau_0^A/\tau_0^B = 1, 2, 5, 10, 20$ et $\tau_0^B/\tau_0^A = 1, 2, 5, 10, 20$. La figure 6.5 montre les taux de déformations équivalents obtenus par simulation FFT dans deux monocristaux de porosité $f = 0.01$ et d'exposant de viscosité $n = 10$ où $\tau_0^B/\tau_0^A = 20$ et où $\tau_0^A/\tau_0^B = 20$. Aux alentours des cavités, la localisation des taux de déformations semble former des « bandes » (en 2D, qui sont des cylindres en 3D). Ces « bandes » où sont localisés les taux de déformations n'ont pas la même direction suivant que le cristal se déforme principalement selon la famille A ($\tau_0^A/\tau_0^B = 20$) ou la famille B ($\tau_0^B/\tau_0^A = 20$).

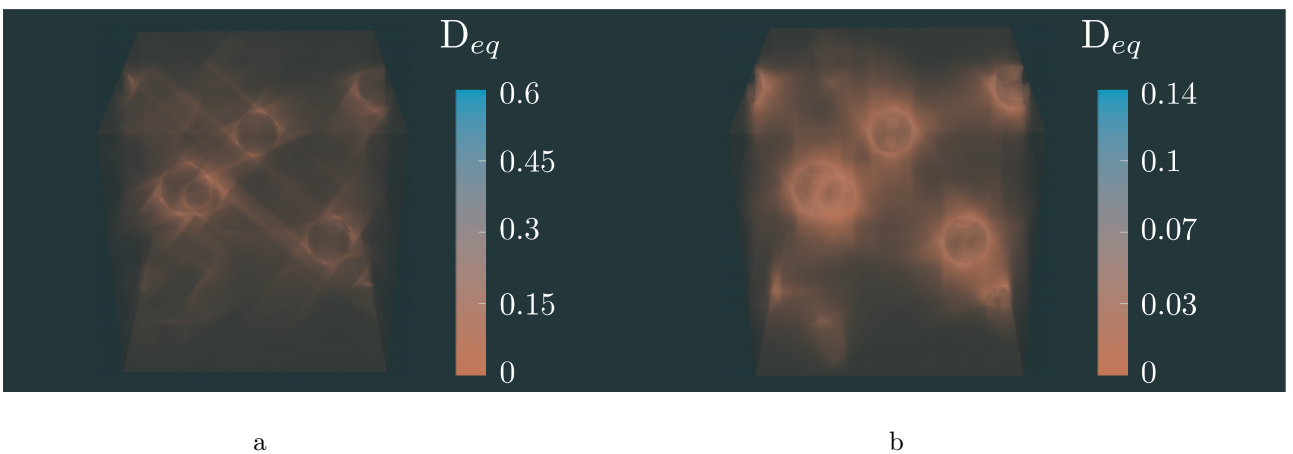


FIGURE 6.5 – Cartes des taux de déformation équivalents pour des cristaux ioniques fortement anisotropes de porosité $f = 0.01$ et d'exposant de viscosité $n = 10$. a : cristal se déformant principalement le long de la famille A de sorte que $\tau_0^B/\tau_0^A = 20$. b : cristal se déformant principalement le long de la famille B de sorte que $\tau_0^A/\tau_0^B = 20$.

La figure 6.6 montre la contrainte d'écoulement hydrostatique en fonction du contraste de glissement pour des monocristaux poreux où $f = 0.01$ et différents exposants n . Les résultats FFT présentent une augmentation

monotone de la contrainte d'écoulement hydrostatique pour une augmentation du contraste de glissement, comme attendu, quoique avec différents comportements asymptotiques dépendants de la famille de systèmes de glissement ayant la cission critique la plus importante. Quand $\tau_0^B > \tau_0^A$, les résultats FFT semblent évoluer linéairement avec le ratio $\tau_0^B > \tau_0^A$ pour toutes les valeurs de n . Mais quand $\tau_0^A > \tau_0^B$ les résultats FFT semblent évoluer selon un exposant dépendant de n plus petit, et même saturer à une valeur finie. Il doit être rappelé que lorsque ces ratios tendent vers l'infini, le cristal devient plastiquement déficient : la limite $\tau_0^B \rightarrow \infty$ correspond à un cristal se déformant le long de systèmes de glissement appartenant seulement à la famille A , qui a deux systèmes de glissement linéairement indépendants, tandis que la limite $\tau_0^A \rightarrow \infty$ correspond à un cristal se déformant le long de systèmes de glissement appartenant à la famille B seulement, qui a trois systèmes de glissement linéairement indépendants. Aussi, les résultats FFT suggèrent que les monocristaux poreux avec deux systèmes de glissement linéairement indépendants peuvent être rigides, tandis que ceux avec trois systèmes de glissement linéairement indépendants restent déformables sous chargement hydrostatique. Cette observation est en accord avec de récents travaux sur les polycristaux poreux avec des méthodes d'homogénéisations basées sur l'approche du milieu linéaire de comparaison (Ramos Nervi et Idiart, 2015). D'un autre côté, les simulations par éléments finis de monocristaux poreux hexagonaux compacts avec une cellule unitaire complexe menée par Mbiakop *et al.* (2015) suggère que les cristaux avec trois systèmes linéairement indépendants peuvent être rigides sous chargement hydrostatique. Toutefois, des chargements sphériques dans le contexte de monocristaux poreux hexagonaux compacts n'ont pas la même signification que dans le contexte de monocristaux poreux cubiques, puisque la déformation provoquée n'est pas sphérique. De plus, toutes ces simulations en champ complet sont numériquement exigeantes et ne peuvent être interprétées comme conclusion évidente pour la réponse de monocristaux poreux déficients.

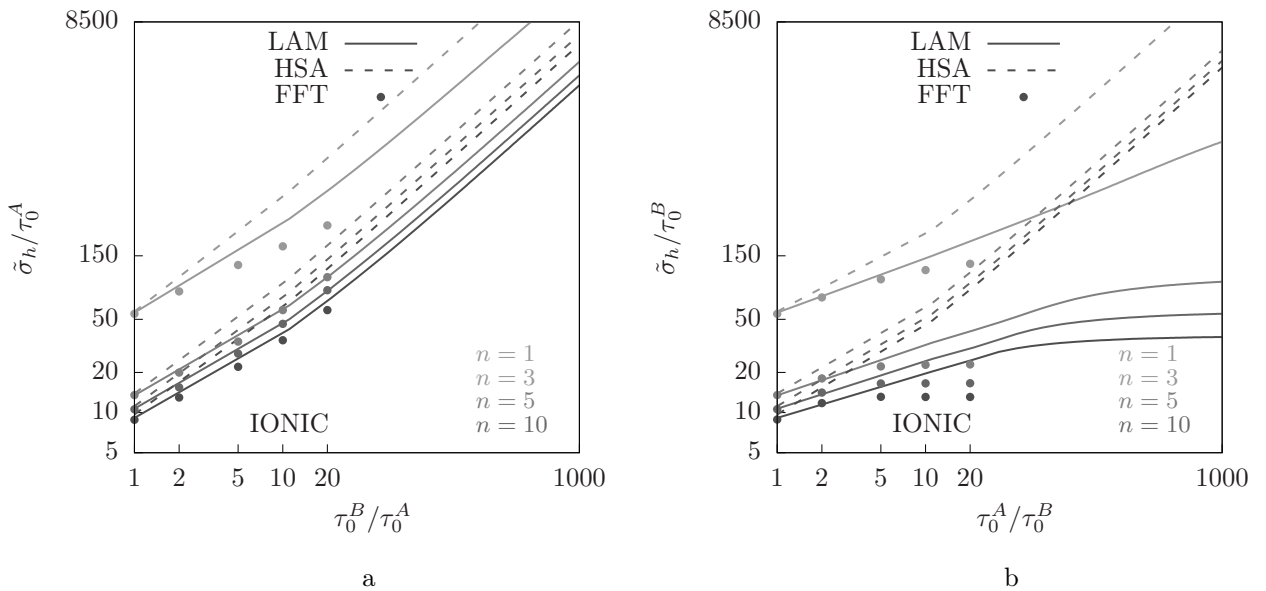


FIGURE 6.6 – Prédiction de la contrainte d'écoulement hydrostatique pour des cristaux ioniques se déformant le long des familles A et B seulement, en fonction du contraste de glissement, pour $f = 0.01$ et différents exposants n . a : $\tau_0^B/\tau_0^A \geq 1$. b : $\tau_0^A/\tau_0^B \geq 1$.

En tout cas, les comparaisons sur la figure 6.6 montrent clairement que l'estimation basée sur les laminés de rang infinis peut être bien plus précise que l'estimation basée sur l'assemblage de sphères creuses dès que l'anisotropie plastique est forte. C'est la conséquence de différents comportements asymptotiques exhibés par

ces deux estimations lorsque le contraste de glissement tend vers l'infini et que le cristal devient déficient. D'un côté, les estimations basées sur l'assemblage de sphères creuses évoluent linéairement quand les deux ratios τ_0^A/τ_0^B et τ_0^B/τ_0^A tendent vers l'infini. On rappelle que ces estimations deviennent non bornées quand le cristal est déficient, comme déjà montré plus haut. D'un autre côté, les estimations basées sur les laminés séquencés évolue linéairement avec τ_0^B/τ_0^A mais pas avec τ_0^A/τ_0^B . Dans le dernier cas, la vitesse d'évolution diminue quand l'exposant n augmente.

Dans tous les cas, les estimations basées sur les laminés séquencés sont meilleures que celles basées sur l'assemblage de sphères creuses et prédisent la réponse hydrostatique de monocristaux poreux cubiques avec une précision raisonnable, même pour des cristaux fortement anisotropes.

3 Chargement axisymétrique

Les estimations HSA et LAM sont maintenant comparées pour une triaxialité $X_{\bar{D}} = \bar{D}_m/\bar{D}_{eq}$ quelconque, par le moyen de surfaces de jauge. Pour rappel, les propriétés d'homogénéité du potentiel effectif \tilde{u} permettent d'écrire

$$\tilde{u}(\bar{\sigma}) = \frac{\tau_0 \dot{\gamma}_0}{n+1} \left| \frac{\lambda(\bar{\sigma})}{\tau_0} \right|^{n+1} \quad (6.1)$$

où τ_0 est une contrainte de référence et où la fonction λ dépend des paramètres cristallins et microstructuraux. Le tenseur des contraintes normalisé $\Sigma = \bar{\sigma}/\lambda(\bar{\sigma})$ permet de définir la surface de jauge comme

$$\mathcal{S}(\Sigma) = \left\{ \Sigma \in \mathcal{T} : \tilde{u}(\Sigma) = \frac{\dot{\gamma}_0 \tau_0^{-n}}{n+1} \right\}. \quad (6.2)$$

En pratique, pour une contrainte arbitraire $\bar{\sigma}$ donnée, on évalue $\lambda(\bar{\sigma})$ via l'expression (6.1) (cela implique que \tilde{u} est connu, ce qui n'est pas le cas ici) puis on calcul Σ via l'expression $\Sigma = \bar{\sigma}/\lambda(\bar{\sigma})$. On peut ensuite représenter les invariants du tenseur Σ , notamment la surface Σ_{eq} en fonction de Σ_m . Il est rappelé que la réponse des laminées de rang infini ou de l'assemblage de Hashin dérive d'un potentiel de dissipation \tilde{w} dual à \tilde{u} . Ici, pour un taux de déformation arbitraire \bar{D} donné, d'une part on évalue la réponse $\bar{\sigma}$ définie comme $\bar{\sigma} = \partial_{\bar{D}} \tilde{w}(\bar{D})$, d'autre part on évalue $\tilde{w}(\bar{D})$. Finalement, $\lambda(\bar{\sigma})$ est calculé via la propriété $\tilde{w}(\bar{D}) = n\tilde{u}(\bar{\sigma})$ injectée dans l'expression (6.1). Il ne reste alors plus qu'à calculer $\Sigma = \bar{\sigma}/\lambda(\bar{\sigma})$. Les laminés de rang infinis ainsi que l'assemblage Hashin sont sollicités par un taux de déformation axisymétrique, c'est-à-dire par un taux de déformation de la forme $\bar{D} = \bar{D}_m \mathbf{I} + \bar{D}_{eq} \mathbf{\Lambda}$ avec $\mathbf{\Lambda} = \Lambda_1 \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \Lambda_1 \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 + \Lambda_2 \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3$ et $2\Lambda_1 + \Lambda_2 = 0$. Deux types de chargements axisymétriques sont considérés : les chargements de type $\Lambda_1 < \Lambda_2$ où par exemple $\Lambda_1 = -1/2$ et $\Lambda_2 = 1$ et les chargements de type $\Lambda_1 > \Lambda_2$ où par exemple $\Lambda_1 = 1/2$ et $\Lambda_2 = -1$. On étudie l'effet de l'anisotropie cristalline sur les laminées de rang infinis et sur l'assemblage de sphères creuses pour des triaxialités $X_{\bar{D}} = \bar{D}_m/\bar{D}_{eq}$ définies par $\bar{D}_m = \cos(\theta)/3$ et $\bar{D}_{eq} = \sin(\theta)$ où θ varie entre 0 et $\pi/2$. La distribution uniforme des cavités et la symétrie cubique de la matrice impliquent qu'un taux de déformation axisymétrique (dans les directions principales du cristal) de triaxialité $X_{\bar{D}} = \bar{D}_m/\bar{D}_{eq}$ provoque une réponse en contrainte axisymétrique de triaxialité $X_{\bar{\sigma}} = \bar{\sigma}_m/\bar{\sigma}_{eq}$.

La réponse des microstructures périodiques est représentée grâce au fait que $\tilde{w}(\bar{D}) = \bar{\sigma} \cdot \bar{D}$, où $\bar{\sigma}$ et \bar{D} sont évalués par simulation FFT. Seuls les premiers tirages des cellules unitaires (voir figure 5.2), discrétisés par 256^3 voxels, sont utilisés pour des porosités $f = 0.01$, $f = 0.05$ et $f = 0.1$. Les cellules unitaires sont sollicitées par une direction de contrainte imposée de la forme $\bar{\sigma}_0 = \bar{\sigma}_{m0} \mathbf{I} + 2/3 \bar{\sigma}_{eq0} \mathbf{\Lambda}$. Là encore deux types de chargements axisymétriques sont considérés (chargements de type $\Lambda_1 < \Lambda_2$ et chargements de type $\Lambda_1 >$

Λ_2). Les microstructures périodiques sont sollicitées pour des triaxialités $X_{\bar{\sigma}} = \bar{\sigma}_m / \bar{\sigma}_{eq}$ choisies comme valant 0, 1, 2, 3, 5, 10, 20 ou ∞ .

Les estimations HSA et LAM sont comparées aux simulations numériques en champ complet dans la figure 6.7 pour des chargements axisymétriques de type $\Lambda_1 < \Lambda_2$ et de type $\Lambda_1 > \Lambda_2$ sur des cristaux cubiques à faces centrées faiblement anisotropes ayant une porosité $f = 0.01$ et des exposants de viscosité $n = 1$ et $n = 10$. Les courbes présentent la surface de jauge dans le plan $\Sigma_m - \Sigma_{eq}$ où le ratio entre les deux échelles des axes Σ_m et Σ_{eq} a volontairement été modifié pour exacerber les différences entre les deux types de chargements axisymétriques. Les deux estimations sont cohérentes avec les résultats FFT. De plus, la différence entre les surfaces de jauge de type $\Lambda_1 < \Lambda_2$ et de type $\Lambda_1 > \Lambda_2$ est soit imperceptible (voir inexistant) dans le cas linéaire visqueux soit très faible (au maximum $\sim 0.05\%$ de différence) dans le cas où $n = 10$. Ce faible écart permet de constater que l'effet du troisième invariant $\det(\Sigma)$ est négligeable. Par la suite, on se concentre sur la comparaison de surfaces de jauges dans le plan $\Sigma_m - \Sigma_{eq}$ pour $\Lambda_1 < \Lambda_2$.

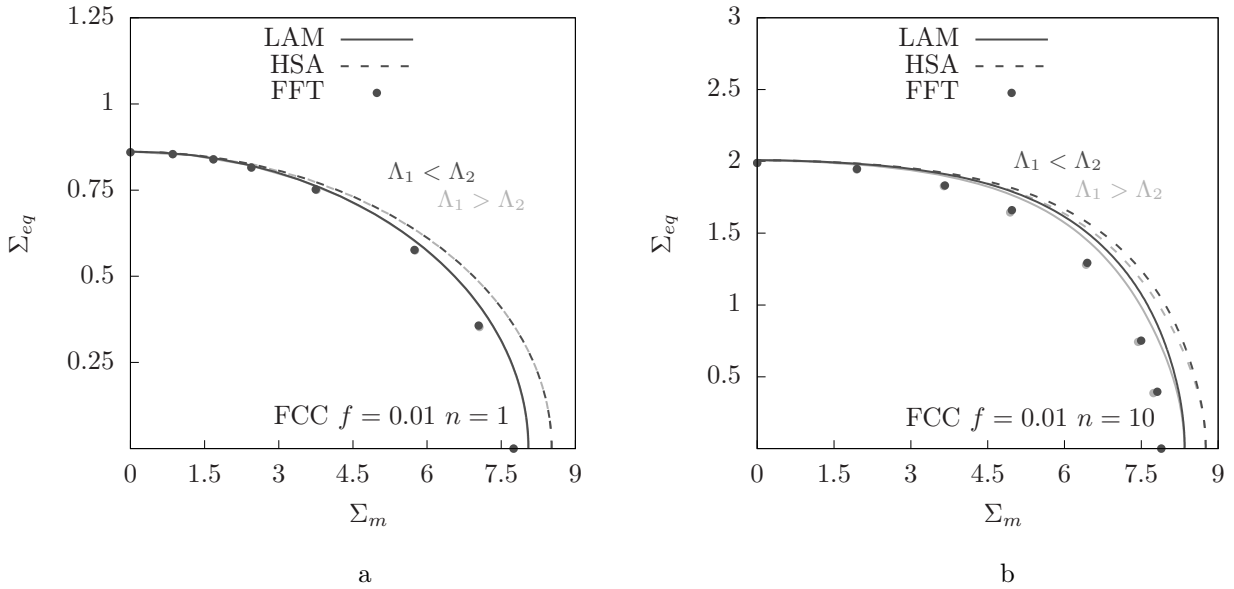


FIGURE 6.7 – Surfaces de jauge dans le plan $\Sigma_m - \Sigma_{eq}$ pour des cristaux cubiques à faces centrées faiblement anisotropes ($\tau_0^{(k)} = \tau_0 \forall k$) sujets à des chargements axisymétriques de type $\Lambda_1 < \Lambda_2$ et $\Lambda_1 > \Lambda_2$ pour une porosité $f = 0.01$. a : Pour un exposant de viscosité $n = 1$. b : Pour un exposant de viscosité $n = 10$. Dans les deux figures, les points FFT pour $\Lambda_1 < \Lambda_2$ et $\Lambda_1 > \Lambda_2$ sont quasiment confondus.

L'estimation HSA+ n'est pas représentée sur la figure 6.7 car elle est insensible aux effets du troisième invariant. L'estimation HSA+ est brièvement comparée à l'estimation HSA et aux simulations FFT dans la figure 6.8. Comme attendu, les estimations sont équivalentes en viscosité linéaire. Pour un fort exposant de viscosité ($n = 10$), l'estimation HSA+ est en faible accord avec les simulations FFT. L'estimation LAM et les simulations FFT sont comparées dans la figure 6.8 aux simulations par éléments finis de Mbiakop *et al.* (2015) ainsi qu'aux estimations MVAR (Mbiakop *et al.*, 2015) et ISO (Song et Ponte Castañeda, 2017a,b). Les courbes présentent la surface de jauge dans le plan $\Sigma_m - \Sigma_{eq}$ pour des chargements axisymétriques de type $\Lambda_1 < \Lambda_2$ sur des cristaux cubiques à faces centrées faiblement anisotropes ayant une porosité $f = 0.01$ et des exposants de viscosité $n = 1$ et $n = 10$. Les simulations FFT et FEM sont en accord avec les approches LAM et MVAR (Mbiakop *et al.*, 2015) pour des exposants $n = 1$ et $n = 10$.

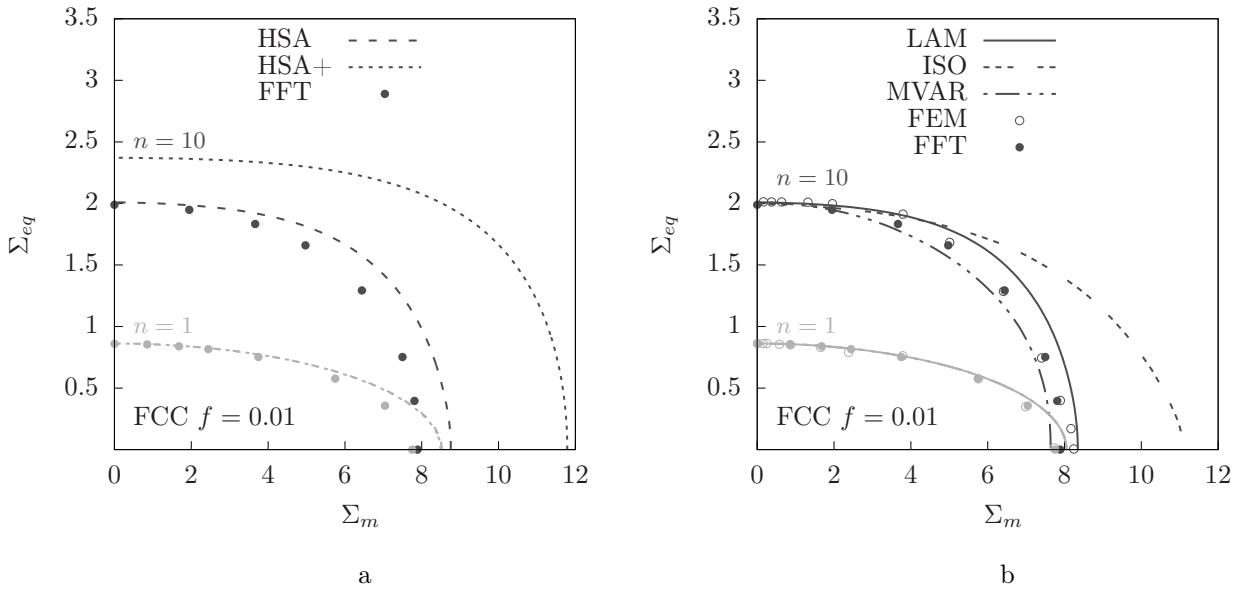


FIGURE 6.8 – Surfaces de jauge dans le plan $\Sigma_m - \Sigma_{eq}$ pour des cristaux cubiques à faces centrées faiblement anisotropes ($\tau_0^{(k)} = \tau_0 \forall k$) sujets à un chargement axisymétrique de type $\Lambda_1 < \Lambda_2$ pour une porosité $f = 0.01$ et des exposants de viscosité $n = 1$ et $n = 10$. a : Comparaison des estimations HSA+ et HSA avec les simulations FFT. b : Comparaison de l'estimation LAM avec les simulations FEM de [Mbiakop et al. \(2015\)](#) ainsi que les estimations MVAR de [Mbiakop et al. \(2015\)](#) et ISO de [Song et Ponte Castañeda \(2017a,b\)](#). Pour $n = 1$, les courbes ISO et MVAR sont confondues.

Les estimations HSA et LAM et les simulations FFT sont maintenant comparées dans les figures [6.9](#), [6.10](#) et [6.11](#) cette fois-ci pour les trois types de cristaux. Les courbes présentent la surface de jauge dans le plan $\Sigma_m - \Sigma_{eq}$ pour des chargements axisymétriques de type $\Lambda_1 < \Lambda_2$ sur des cristaux cubiques à faces centrées faiblement anisotropes ayant une porosité $f = 0.01$ et des exposants de viscosité $n = 1$ et $n = 10$. Les estimations sont en accord avec les simulations pour tous les paramètres considérés. Les différences entre les approches HSA et LAM sont moins exacerbées pour les cristaux ioniques que pour les cristaux cubiques à faces centrées. La géométrie des cristaux ioniques, notamment leur nombre élevé de systèmes de glissements ($K = 24$) en comparaison aux cubiques à faces centrées ($K = 12$) réduit l'anisotropie du cristal. De ce fait, les cristaux ioniques ont une réponse plus proche d'un matériau de von Mises (isotrope), du moins pour un assemblage de sphères creuses, que les cristaux cubiques à faces centrées. Il est rappelé que la réponse d'une sphère creuse faite d'un matériau de von Mises est obtenue de manière exacte pour un chargement hydrostatique ([Michel et Suquet, 1992](#)).

Les figures [6.9](#), [6.10](#) et [6.11](#) suggèrent que l'approche des laminés est meilleure que l'approche de la sphère creuse, du moins pour de forts exposants de viscosité ($n = 10$). De plus, les différences entre les deux approches sont substantielles pour les cristaux cubiques à faces centrées. La surface de jauge construite dans le chapitre [3](#) section [6](#) basée sur la méthode de [Leblond et al. \(1994\)](#) a tout intérêt à être ajustée non pas sur l'approche de la sphère creuse mais sur l'approche des laminés. La surface de type LPS est réajustée sur les laminées ce qui revient finalement à remplacer α_{HSA} par α_{LAM} dans l'expression [\(3.42\)](#). L'estimation LPS est comparée à l'estimation LAM dans la figure [6.12](#). On se focalise ici sur des cristaux cubiques à faces centrées car l'estimation LPS sera essentiellement utilisée sur cette symétrie cristalline particulière. Les courbes présentent la surface de jauge dans le plan $\Sigma_m - \Sigma_{eq}$ pour des chargements axisymétriques de type $\Lambda_1 < \Lambda_2$ sur des cristaux cubiques à faces centrées faiblement anisotropes pour des porosités $f = 0.01$ et $f = 0.1$ et des exposants de viscosité $n = 1$ et $n = 15$. Il y a un bon accord entre les deux estimations.

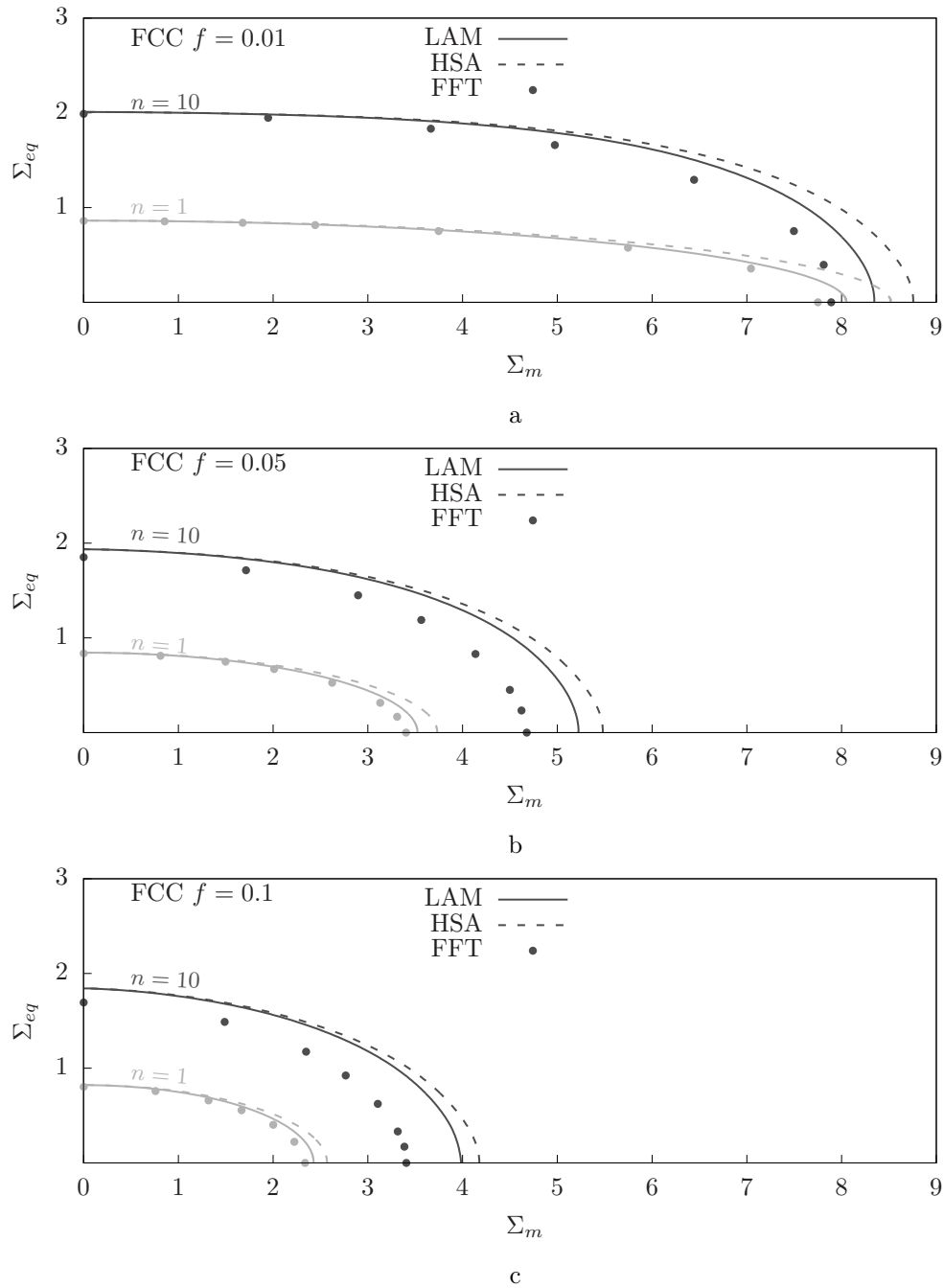


FIGURE 6.9 – Surfaces de jauge dans le plan $\Sigma_m - \Sigma_{eq}$ pour des cristaux cubiques à faces centrées faiblement anisotropes ($\tau_0^{(k)} = \tau_0 \forall k$) sujets à un chargement axisymétrique de type $\Lambda_1 < \Lambda_2$ pour des exposants de viscosité $n = 1$ et $n = 10$. a : pour une porosité $f = 0.01$. b : pour une porosité $f = 0.05$. c : pour une porosité $f = 0.1$.

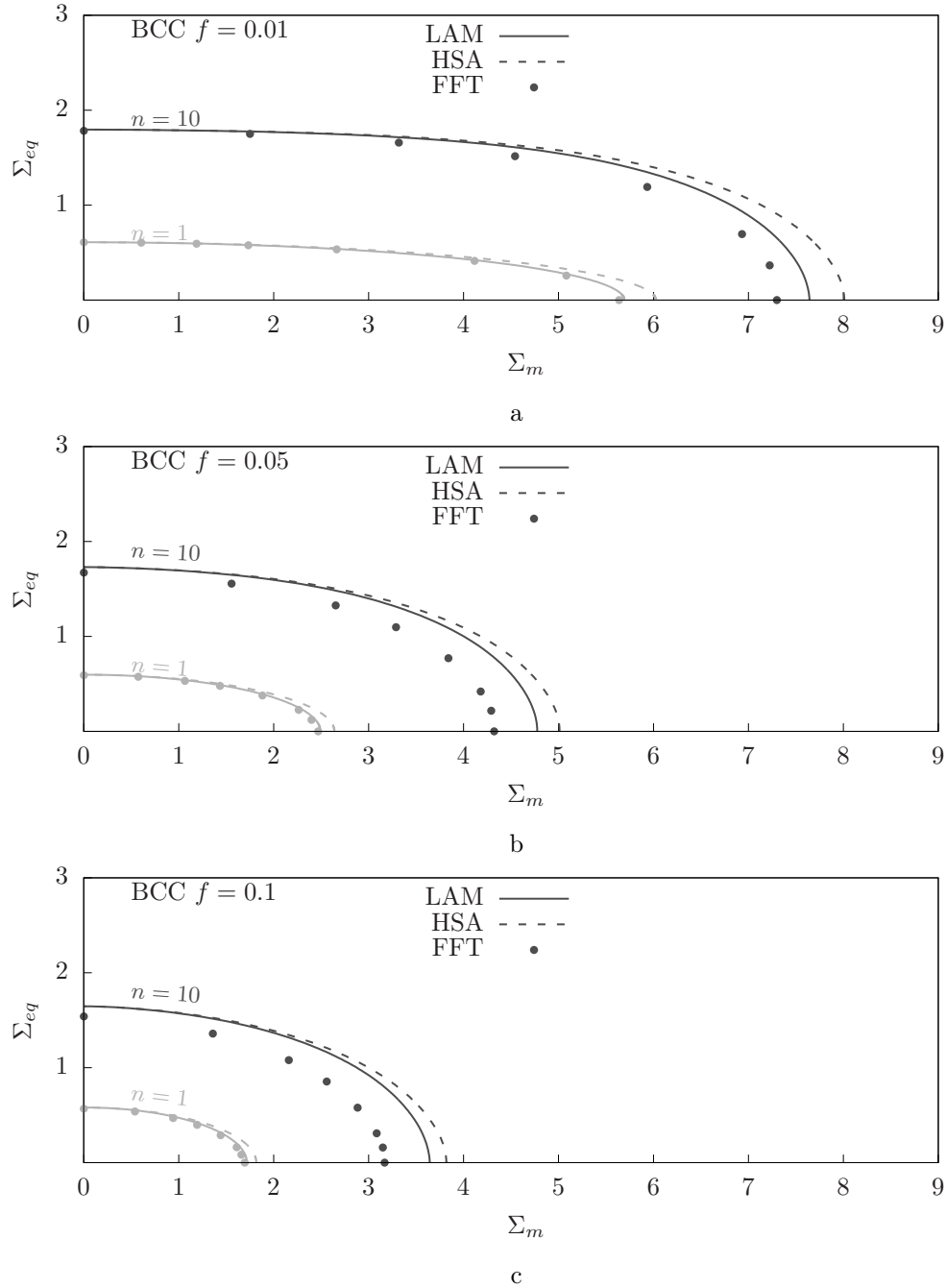


FIGURE 6.10 – Surfaces de jauge dans le plan $\Sigma_m - \Sigma_{eq}$ pour des cristaux cubiques centrés faiblement anisotropes ($\tau_0^{(k)} = \tau_0 \forall k$) sujets à un chargement axisymétrique de type $\Lambda_1 < \Lambda_2$ pour des exposants de viscosité $n = 1$ et $n = 10$. a : pour une porosité $f = 0.01$. b : pour une porosité $f = 0.05$. c : pour une porosité $f = 0.1$.

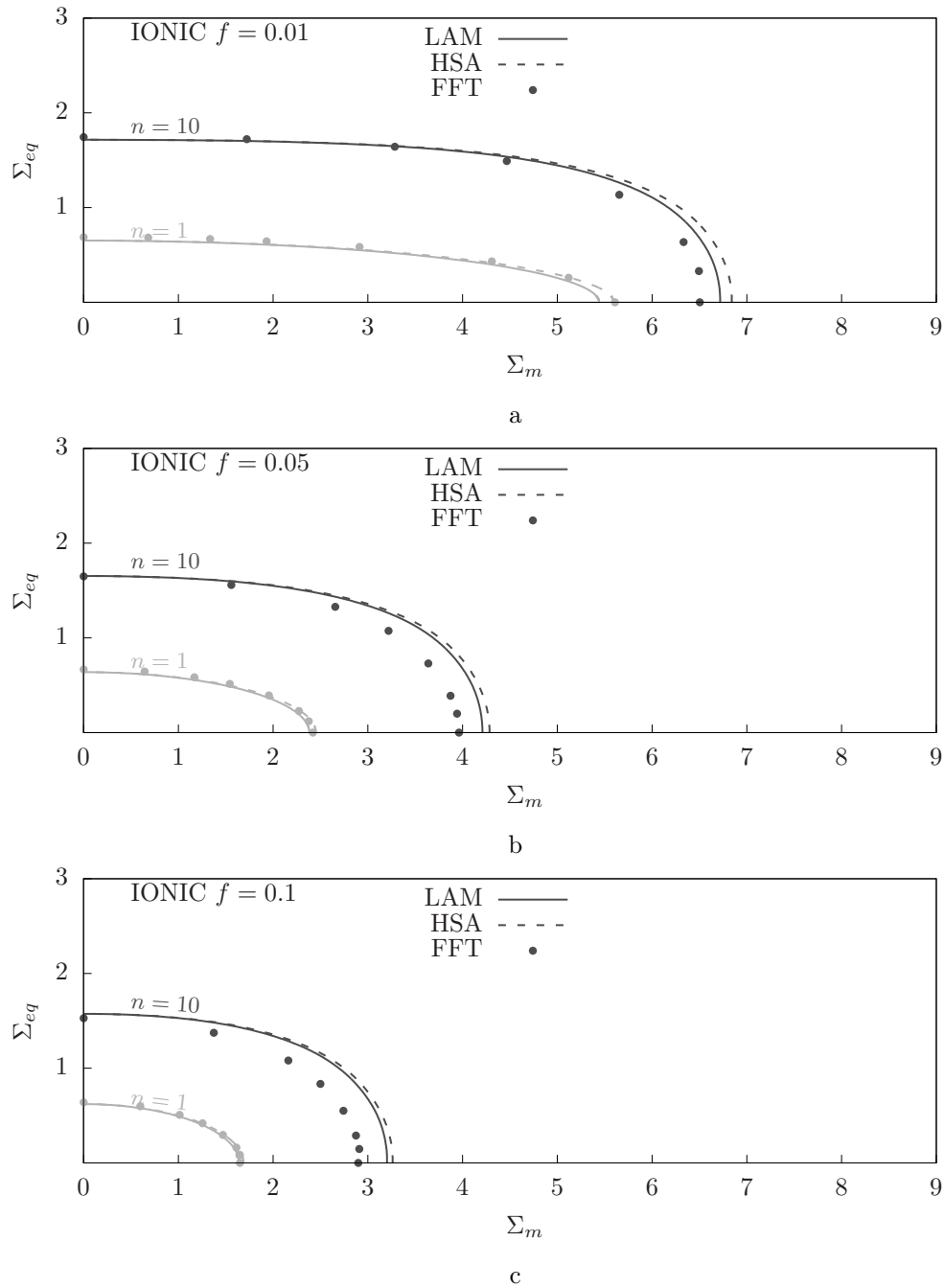


FIGURE 6.11 – Surfaces de jauges dans le plan $\Sigma_m - \Sigma_{eq}$ pour des cristaux ioniques faiblement anisotropes ($\tau_0^{(k)} = \tau_0 \forall k$) sujets à un chargement axisymétrique de type $\Lambda_1 < \Lambda_2$ pour des exposants de viscosité $n = 1$ et $n = 10$. a : pour une porosité $f = 0.01$. b : pour une porosité $f = 0.05$. c : pour une porosité $f = 0.1$.

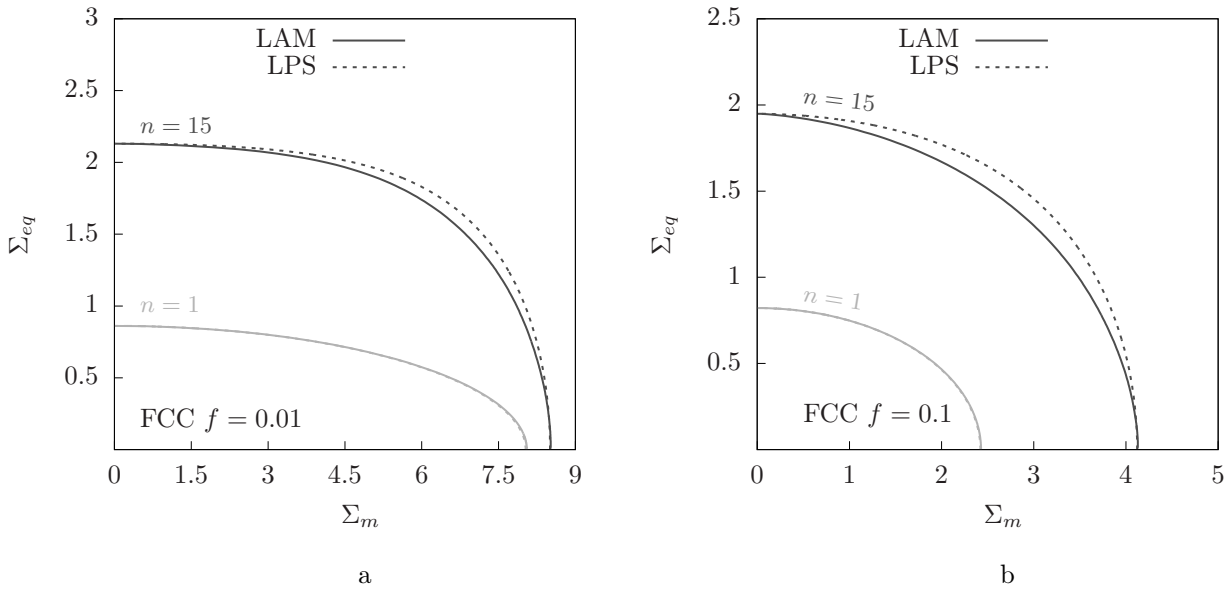


FIGURE 6.12 – Surfaces de jauge dans le plan $\Sigma_m - \Sigma_{eq}$ pour des cristaux cubiques à faces centrées faiblement anisotropes ($\tau_0^{(k)} = \tau_0 \forall k$) d'exposant de viscosité $n = 1$ ou $n = 15$ sujets à un chargement axisymétrique de type $\Lambda_1 < \Lambda_2$. a : Pour une porosité $f = 0.01$. b : Pour une porosité $f = 0.1$.

4 Conclusion

Les différentes estimations développées dans les chapitres précédents ont été comparées à des simulations FFT et aux estimations trouvées dans la littérature. Les estimations LAM et HSA sont en accord avec les simulations numériques pour des cristaux faiblement anisotropes, quoique les laminés semblent fournir de meilleurs résultats de manière générale. L'estimation HSA+ n'est pas en accord avec les simulations numériques, mais il a été montré que la surface de jauge (estimation LPS) construite à partir de l'approche HSA+, une fois recalée avec les laminés, est en accord avec les simulations. D'autre part, pour des cristaux fortement anisotropes, les laminés semblent correctement reproduire les tendances des simulations numériques, du moins pour un chargement hydrostatique. De manière générale, l'approche des laminés semble mieux reproduire le comportement viscoplastique de monocristaux poreux et ce pour une large gamme d'anisotropie, d'exposant de viscosité et de porosité. C'est pourquoi cette approche est utilisée pour recalibrer des modèles moins performants mais peu coûteux à évaluer.

Chapitre 7

Application aux polycristaux poreux

Ce chapitre présente une estimation pour polycristaux poreux en viscoplasticité. L'estimation est construite à partir des développements concernant les monocristaux poreux menés dans les chapitres précédents. L'estimation pour polycristaux poreux est ensuite confrontée à des simulations FFT sur des microstructures polycristallines denses où localement le comportement dérive de l'estimation pour monocristaux poreux de type ([Leblond *et al.*, 1994](#)).

Sommaire

1	Introduction	78
2	Propriétés effectives des polycristaux denses	78
3	Propriétés effectives des polycristaux poreux	78
4	Surface de jauge	80
5	Conclusion	82

1 Introduction

Des estimations pour polycristaux denses, basées sur l'utilisation d'un milieu linéaire de comparaison, ont déjà été proposés en viscoplasticité, notamment par [deBotton et Ponte Castañeda \(1995\)](#), [Nebozhyn *et al.* \(2000, 2001\)](#), [Liu *et al.* \(2003\)](#), [Liu et Ponte Castañeda \(2004\)](#) ou [Idiart \(2012\)](#). [Lebensohn *et al.* \(2011\)](#) ont présenté des bornes basées sur l'utilisation d'un milieu linéaire de comparaison pour polycristaux poreux, où les cavités sont intergranulaires car les vides constituent une des phases au même titre que les grains. Récemment, [Song et Ponte Castañeda \(2018a,b\)](#) proposent une estimation pour polycristaux poreux où la taille caractéristique des grains (décrits comme des cristaux au comportement viscoplastique) est bien plus petite que la taille caractéristique des cavités. A contrario, la taille caractéristique des pores est ici bien plus petite que celle des grains et la prise en compte de la porosité intragranulaire nécessite une étape d'homogénéisation au niveau du grain. Dans une deuxième étape d'homogénéisation, le polycristal poreux est représenté comme un matériau hétérogène constitué de N phases homogènes, dont le comportement de chacune correspond au comportement homogénéisé d'un monocristal poreux. Chaque phase est constituée du même matériau cristallin dont l'orientation peut différer. Les phases sont distribuées de manière statistiquement uniforme et leur taille caractéristique est bien plus petite que celle du volume élémentaire représentatif de la structure polycristalline.

2 Propriétés effectives des polycristaux denses

Dans le cadre de la viscoplasticité de type loi puissance, le potentiel effectif en contrainte $\tilde{U}(\bar{\sigma})$ d'un polycristal dense (sans cavités) hérite de u des propriétés d'homogénéité de degré $n + 1$ en $\bar{\sigma}$ et de degré 1 en $\dot{\gamma}_0$. De plus, l'incompressibilité du polycristal conduit à une dépendance de \tilde{U} en $\bar{\sigma}$ seulement par son déviateur. Comme rencontré dans [\(Liu et Ponte Castañeda, 2004\)](#), le potentiel effectif en contrainte prend la forme

$$\tilde{U}(\bar{\sigma}) = \frac{\dot{\gamma}_0 \tilde{\sigma}_0}{n + 1} \left(\frac{\bar{\sigma}_{eq}}{\tilde{\sigma}_0} \right)^{n+1} \quad (7.1)$$

où la contrainte d'écoulement $\tilde{\sigma}_0$ dépend de l'exposant n , des cissons de référence $\tau_0^{(k)}$ et des tenseurs de Schmid $\mu^{(k)}$ du cristal ainsi que du chargement. Lorsque la distribution des grains ainsi que la distribution des orientations cristallines sont toutes deux choisies comme uniformes, le polycristal a un comportement isotrope et la fonction $\tilde{\sigma}_0$ dépend (du moins en chargement) seulement du ratio $3(1/2 \det \bar{\sigma}_d)^{1/3} / \bar{\sigma}_{eq}$ (voir [\(Liu et Ponte Castañeda, 2004\)](#)).

De manière analogue, le potentiel effectif \tilde{W} hérite de w des propriétés d'homogénéité de degré $1 + 1/n$ en \bar{D} et de degré $-1/n$ en $\dot{\gamma}_0$. De plus, l'incompressibilité du polycristal conduit à une dépendance de \tilde{W} en \bar{D} seulement par son déviateur. Si on néglige les effets du troisième invariant, il vient que le potentiel effectif \tilde{W} peut être exprimé comme

$$\tilde{W}(\bar{D}) = \frac{\dot{\gamma}_0 \tilde{\sigma}_0}{1 + 1/n} \left(\frac{\bar{D}_{eq}}{\dot{\gamma}_0} \right)^{1+1/n} \quad (7.2)$$

où la contrainte d'écoulement $\tilde{\sigma}_0$ correspond à celle de l'expression (7.1) uniquement si les effets du troisième invariant sont négligés.

3 Propriétés effectives des polycristaux poreux

Conformément à la démarche de double changement d'échelles proposée dans le chapitre 1 section 3, le potentiel effectif de dissipation \tilde{W} du matériau multiphasé est défini par un principe de minimum d'énergie

dissipée (voir par exemple (Willis, 1989)), énoncé dans le chapitre 2 section 3, et particularisé ici à un matériau constitué de N phases comme

$$\tilde{W}(\bar{\mathbf{D}}) = \min_{\mathbf{D} \in \mathcal{K}(\bar{\mathbf{D}})} \sum_{r=1}^N c^{(r)} \langle \tilde{w}^{(r)}(\mathbf{D}) \rangle_{\Omega^{(r)}} \quad (7.3)$$

où il est rappelé que $c^{(r)} = \langle \chi^{(r)}(\mathbf{x}) \rangle_{\Omega}$ est la fraction volumique de la phase r . L'ensemble $\mathcal{K}(\bar{\mathbf{D}})$ des taux de déformations cinématiquement admissibles est définie par (2.16). Ici, le potentiel \tilde{W} caractérise le comportement d'un polycristal poreux et le comportement local, équivalent au comportement homogénéisé d'un monocristal poreux, est noté $\tilde{w}^{(r)}$ par soucis de cohérence avec les chapitres précédents. En considérant un champ de taux de déformations homogène (borne de Voigt), l'expression précédente peut s'écrire

$$\tilde{W}(\bar{\mathbf{D}}) \leq \sum_{r=1}^N c^{(r)} \tilde{w}^{(r)}(\bar{\mathbf{D}}). \quad (7.4)$$

Dans chaque grain, le potentiel $\tilde{w}^{(r)}$ est le même (les grains ont le même comportement), mais le tenseur des taux de déformation $\bar{\mathbf{D}}$ doit être exprimé dans la base du grain. On note $\mathbf{Q}^{(r)}$ la matrice de passage de la base canonique à celle du grain. Alors,

$$\tilde{w}^{(r)}(\bar{\mathbf{D}}) = \tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}(\mathbf{Q}^{(r)})) = \tilde{w}(\mathbf{Q}^{(r)} \bar{\mathbf{D}} \mathbf{Q}^{(r)T}). \quad (7.5)$$

La relation (7.4) devient

$$\tilde{W}(\bar{\mathbf{D}}) \leq \sum_{r=1}^N c^{(r)} \tilde{w}(\mathbf{Q}^{(r)} \bar{\mathbf{D}} \mathbf{Q}^{(r)T}). \quad (7.6)$$

Pour une distribution statistiquement uniforme des grains du polycristal, asymptotiquement (pour une infinité de grains) on peut considérer que le volume élémentaire représentatif a une forme sphérique dont chaque point est un grain. Les orientations des grains dans le volume élémentaire représentatif sont équiprobables. Alors (7.6) peut être évalué par une intégration sur la sphère unitaire (pas de dépendance radiale pour \tilde{w}) tel que

$$\tilde{W}(\bar{\mathbf{D}}) \leq \langle \tilde{w}(\mathbf{Q} \bar{\mathbf{D}} \mathbf{Q}^T) \rangle. \quad (7.7)$$

On recherche une estimation (la plus analytique possible) du comportement viscoplastique d'un polycristal poreux en se basant sur les estimations pour monocristaux poreux développées dans les chapitres précédents. L'approche HSA+ se prête bien à des développements analytiques. La dernière expression peut se réécrire

$$\tilde{W}(\bar{\mathbf{D}}) \leq \langle \tilde{w}_+(\mathbf{Q} \bar{\mathbf{D}} \mathbf{Q}^T) \rangle. \quad (7.8)$$

Pour des cristaux faiblement anisotropes ($\tau_0^{(k)} = \tau_0 \forall k$) et à partir de l'expression (3.20),

$$\tilde{W}(\bar{\mathbf{D}}) \leq \frac{\tau_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \int_f^1 \left\langle \left(\frac{1}{\dot{\gamma}_0^2} 9 \bar{D}_m^2 \frac{\kappa^*}{y^2} + \frac{1}{\dot{\gamma}_0^2} \bar{\mathbf{D}}_d(\mathbf{Q}) \cdot \mathbb{L}^* \cdot \bar{\mathbf{D}}_d(\mathbf{Q}) \right)^{(m+1)/2} \right\rangle dy \quad (7.9)$$

où il est rappelé que les termes κ^* et \mathbb{L}^* sont sans dimension. Ils sont définis ici comme $\kappa^* = (K^{(1-m)/(m+1)}/\tau_0)\kappa$ et $\mathbb{L}^* = (K^{(1-m)/(m+1)}/\tau_0)\mathbb{L}$ pour correspondre en plasticité parfaite à $\kappa^* = (K/\tau_0)\kappa$ et $\mathbb{L}^* = (K/\tau_0)\mathbb{L}$. L'inégalité de Cauchy-Schwarz permet de réécrire

$$\tilde{W}(\bar{\mathbf{D}}) \leq \frac{\tau_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \int_f^1 \left(\frac{1}{\dot{\gamma}_0^2} 9 \bar{D}_m^2 \frac{\kappa^*}{y^2} + \frac{1}{\dot{\gamma}_0^2} \langle \bar{\mathbf{D}}_d(\mathbf{Q}) \cdot \mathbb{L}^* \cdot \bar{\mathbf{D}}_d(\mathbf{Q}) \rangle \right)^{(m+1)/2} dy. \quad (7.10)$$

Le scalaire $\bar{\mathbf{D}}_d(\mathbf{Q}) \cdot \mathbb{L}^* \cdot \bar{\mathbf{D}}_d(\mathbf{Q})$ peut être calculé en exprimant $\bar{\mathbf{D}}$ dans la base canonique et en transformant \mathbb{L}^* de la base du monocristal à la base canonique : $\bar{\mathbf{D}}_d(\mathbf{Q}) \cdot \mathbb{L}^* \cdot \bar{\mathbf{D}}_d(\mathbf{Q}) = \bar{\mathbf{D}}_d \cdot \mathbb{L}^*(\mathbf{Q}^T) \cdot \bar{\mathbf{D}}_d$. En suivant un résultat

de (Gatt *et al.*, 2005), moyenner un tenseur sur toutes les orientations possibles revient à projeter le tenseur sur \mathbb{J} et \mathbb{K} . La projection de \mathbb{L}^* sur \mathbb{J} est un tenseur nul. Pour des cristaux cubiques faiblement anisotropes, la projection sur \mathbb{K} du tenseur \mathbb{L}^* , définie comme $(\mathbb{L}^* \cdot \mathbb{K})/(\mathbb{K} \cdot \mathbb{K})\mathbb{K}$ (pour rappel, $\mathbb{K} \cdot \mathbb{K} = 5$), le fait que $\mathbb{L}^* \cdot \mathbb{K} = 1/\alpha^* \mathbb{K}_a \cdot \mathbb{K} + 1/\beta^* \mathbb{K}_b \cdot \mathbb{K}$ (et donc que $\mathbb{L}^* \cdot \mathbb{K} = 2/\alpha^* + 3/\beta^*$) et le fait que $\bar{\mathbf{D}}_d \cdot \mathbb{K} \cdot \bar{\mathbf{D}}_d = 3/2 \bar{D}_{eq}^2$ permettent de réécrire la dernière expression comme

$$\tilde{W}(\bar{\mathbf{D}}) \leq \frac{\tau_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \int_f^1 \left(\frac{1}{\dot{\gamma}_0^2} 9 \bar{D}_m^2 \frac{\kappa^*}{y^2} + \frac{1}{\dot{\gamma}_0^2} q^* \bar{D}_{eq}^2 \right)^{(m+1)/2} dy \quad (7.11)$$

où $q^* = (6\beta^* + 9\alpha^*)/(10\alpha^*\beta^*)$ est un coefficient sans dimension.

D'une manière similaire à la démarche présentée dans le chapitre 3 section 6, le point hydrostatique de l'expression (7.11) (le coefficient κ^*) est ajusté en utilisant l'estimation LAM pour monocristaux poreux. Le point déviatorique (le coefficient q^*) peut aussi être ajusté de sorte à correspondre à une estimation pour polycristal dense proposée par Liu et Ponte Castañeda (2004). Finalement, l'estimation en viscoplasticité, dont le point hydrostatique correspond à l'estimation LAM et dont le point déviatorique correspond à l'estimation de Liu et Ponte Castañeda (2004) pour polycristaux denses, prend la forme

$$\tilde{W}(\bar{\mathbf{D}}) \leq \frac{\tau_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \int_f^1 \left(\frac{1}{\dot{\gamma}_0^2} 9 \bar{D}_m^2 \frac{1}{y^2} \left(\frac{\alpha_{LAM}(n)}{\tau_0} \right)^{2/(n+1)} + \frac{1}{\dot{\gamma}_0^2} \left(\frac{\tilde{\sigma}_0}{\tau_0} \right)^{2n/(n+1)} \bar{D}_{eq}^2 \right)^{(m+1)/2} dy \quad (7.12)$$

où la contrainte d'écoulement $\tilde{\sigma}_0$ adimensionnée par τ_0 a été identifiée dans (Liu et Ponte Castañeda, 2004) pour un chargement uniaxial (on néglige ici l'effet du troisième invariant) pour différents exposants de viscosité, et a été reportée dans le tableau 7.1.

n	1	2	3	5	10	15	50
$\tilde{\sigma}_0/\tau_0$	1.502	2.125	2.343	2.479	2.543	2.552	2.549

TABLE 7.1 – Contrainte d'écoulement $\tilde{\sigma}_0$ normalisée par τ_0 pour un cristal cubique à faces centrées soumis à un chargement uniaxial et différents exposants n . La contrainte d'écoulement $\tilde{\sigma}_0$ correspond à la méthode auto-cohérente dite de second ordre utilisée par Liu et Ponte Castañeda (2004).

La dernière expression constitue une estimation pour polycristaux poreux à cavités intragranulaires où les grains (les monocristaux poreux) sont faiblement anisotropes. Pour un chargement purement hydrostatique, l'estimation prédit que la réponse d'un polycristal poreux est identique à celle d'un monocristal poreux puisque l'orientation cristalline n'a pas d'influence pour ce type de chargement, aussi bien pour chaque grain poreux que pour l'ensemble de la structure polycristalline, du fait que les champs aient été considérés comme constants par phase. L'hypothèse des champs constants par phase justifie le soin particulier accordé dans les chapitres précédents à l'étude du point hydrostatique d'un monocristal poreux.

4 Surface de jauge

On veut aussi proposer une expression analytique d'une surface de jauge pour polycristaux poreux. En plasticité parfaite, l'expression (7.11) se réécrit

$$\tilde{W}(\bar{\mathbf{D}}) \leq \tau_0 \int_f^1 \sqrt{9 \bar{D}_m^2 \frac{\kappa^*}{y^2} + q^* \bar{D}_{eq}^2} dy. \quad (7.13)$$

Le critère de plasticité dérivant de la dernière expression s'écrit (par un raisonnement similaire à celui présenté dans l'annexe B section 4)

$$\frac{1}{q^*} \left(\frac{\bar{\sigma}_{eq}}{\tau_0} \right)^2 + 2f \cosh \left(\frac{1}{\sqrt{\kappa^*}} \frac{\bar{\sigma}_m}{\tau_0} \right) - 1 - f^2 = 0. \quad (7.14)$$

De la même manière que dans le chapitre 3 section 6, par analogie avec la surface de jauge proposée par [Leblond et al. \(1994\)](#), on construit une surface de jauge de type LPS de la forme

$$\frac{1}{q^*} \Sigma_{eq}^2 + f \left(h(\Sigma_m) + \frac{n-1}{n+1} \frac{1}{h(\Sigma_m)} \right) - 1 - \frac{n-1}{n+1} f^2 = 0 \quad (7.15)$$

où

$$h(\Sigma_m) = \left(1 + \frac{1}{n} \left| \frac{1}{\sqrt{\kappa^*}} \Sigma_m \right|^{1+1/n} \right)^n. \quad (7.16)$$

Il est rappelé que $\Sigma = \bar{\sigma}/\lambda(\bar{\sigma})$ et que la surface de jauge de type ([Leblond et al., 1994](#)) a été pensée de sorte à satisfaire trois conditions : correspondre exactement au critère de plasticité quand $n \rightarrow \infty$, correspondre exactement à l'approche de type Gurson sous chargement purement hydrostatique et enfin avoir une forme quadratique en viscosité linéaire. Premièrement, quand $n \rightarrow \infty$, le fait que la fonction $h(x)$ soit équivalente à la fonction $\exp(|x|)$ et donc que $h(x) + 1/h(x)$ équivaut à $2 \cosh(x)$ satisfait la première condition. Deuxièmement, le point hydrostatique doit satisfaire la relation $h(\Sigma_m) = 1/f$. Pour un chargement purement hydrostatique, l'orientation du cristal n'a pas d'influence et l'estimation pour un polycristal poreux est équivalente à celle d'un monocristal poreux. La deuxième condition a déjà été vérifiée pour un monocristal poreux dans le chapitre 3 section 6 et est donc automatiquement vérifiée pour un polycristal poreux. Quand $n = 1$, la troisième condition est automatiquement vérifiée. Les expressions (7.15) et (7.16) définissent bien une surface de jauge de type ([Leblond et al., 1994](#)) pour un polycristal poreux.

Finalement, la surface de jauge de type ([Leblond et al., 1994](#)), dont le point hydrostatique correspond à l'estimation LAM et dont le point déviatorique correspond à l'estimation de [Liu et Ponte Castañeda \(2004\)](#) pour un polycristal dense, prend la forme

$$\left(\frac{\tau_0}{\bar{\sigma}_0} \right)^{2n/(n+1)} \Sigma_{eq}^2 + f \left(h(\Sigma_m) + \frac{n-1}{n+1} \frac{1}{h(\Sigma_m)} \right) - 1 - \frac{n-1}{n+1} f^2 = 0 \quad (7.17)$$

où

$$h(\Sigma_m) = \left(1 + \frac{1}{\alpha_{LAM}(n)} \frac{\tau_0}{n} |\Sigma_m|^{1+1/n} \right)^n. \quad (7.18)$$

Les expressions (7.17) et (7.18) constituent une estimation en viscoplasticité pour polycristaux poreux à cavités intragranulaires où les grains (les monocristaux poreux) sont faiblement anisotropes. Lorsque $n \rightarrow \infty$, le critère de plasticité résultant des deux dernières expressions se résume à

$$\left(\frac{\bar{\sigma}_{eq}}{\bar{\sigma}_0} \right)^2 + 2f \cosh \left(\frac{1}{\beta_{LAM}} \bar{\sigma}_m \right) - 1 - f^2 = 0 \quad (7.19)$$

L'expression (7.19) constitue une estimation en plasticité pour polycristaux poreux à cavités intragranulaires où les grains (les monocristaux poreux) sont faiblement anisotropes.

Sur la figure 7.1, la surface de jauge pour polycristaux poreux est comparée à des simulations numériques effectuées sur une cellule unitaires polycristalline contenant 512 grains et discrétisée avec 256^3 voxels (voir figure 8.1.a), où localement le comportement dérive de la surface de jauge pour monocristaux poreux. Le modèle LPS

pour monocristaux poreux a été implémenté dans CraFT selon l'algorithme présenté à l'annexe D section 3. La figure 7.1 présente la surface de jauge dans le plan $\Sigma_m - \Sigma_{eq}$ pour des chargements axisymétriques de type $\Lambda_1 < \Lambda_2$ sur des cristaux cubiques à faces centrées faiblement anisotropes ayant un exposant de viscosité $n = 15$ pour des porosités $f = 0.01$ et $f = 0.1$.

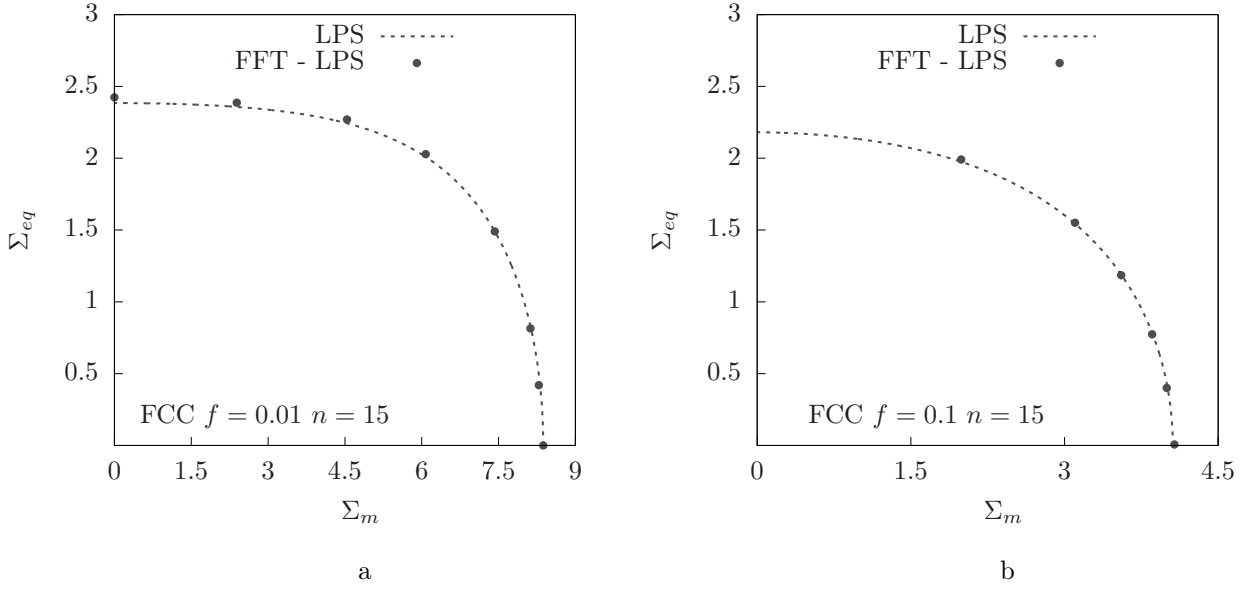


FIGURE 7.1 – Surface de jauge dans le plan $\Sigma_m - \Sigma_{eq}$ pour des polycristaux de structure cristalline cubique à faces centrées faiblement anisotrope ($\tau_0^{(k)} = \tau_0 \forall k$) sujet à un chargement axisymétrique de type $\Lambda_1 < \Lambda_2$ pour un exposant de viscosité $n = 15$ et différentes porosités. a : Pour une porosité $f = 0.01$. b : Pour une porosité $f = 0.1$.

5 Conclusion

L'estimation proposée pour polycristaux à grains poreux faiblement anisotropes, basée sur une moyenne orientationnelle de l'estimation HSA+, puis ajustée sur le point hydrostatique des laminés ainsi que sur le point déviatorique d'une estimation pour polycristaux denses, va permettre de modéliser le comportement viscoplastique d'un acier inoxydable austénitique irradié présentant des cavités intragranulaires.

Chapitre 8

Application à un acier inoxydable austénitique irradié

Ce chapitre présente un modèle cristallin proposé par [Han \(2012\)](#) spécialement dédié à un acier inoxydable austénitique SA304L irradié. Il est utilisé afin d'identifier les paramètres matériaux des estimations proposées dans les chapitres précédents. Au final, on dispose d'un modèle pour polycristaux poreux reproduisant le comportement d'un acier inoxydable austénitique fortement irradié.

Sommaire

1	Introduction	84
2	Propriétés locales d'un acier inoxydable austénitique irradié	84
3	Propriétés effectives d'un acier inoxydable austénitique irradié	87
4	Propriétés effectives d'un acier inoxydable austénitique fortement irradié	90
5	Conclusion	92

1 Introduction

Han (2012) propose plusieurs modèles pour décrire le comportement local d'un acier de type SA304L irradié en intégrant non seulement les mécanismes à l'origine de la viscoplasticité mais aussi les défauts ainsi que leur évolution induits par l'irradiation. Les modèles prennent en compte les différents mécanismes en s'appuyant notamment sur des observations et des résultats issus de la dynamique des dislocations.

2 Propriétés locales d'un acier inoxydable austénitique irradié

Le potentiel en contrainte de type loi puissance (2.8) est généralisé ici comme

$$u(\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{k=1}^K \frac{\tau_0^{(k)} \dot{\gamma}_0^{(k)}}{n+1} \left(\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \right)^{n+1} \quad (8.1)$$

où les taux de glissement de référence $\dot{\gamma}_0^{(k)}$ sont différents pour chaque système de glissement. Les contraintes d'origine viscoplastique sont reliées aux taux de déformations viscoplastiques (notés ici \mathbf{D}^{vp}) par $\mathbf{D}^{vp} = \partial_{\boldsymbol{\sigma}} u(\boldsymbol{\sigma})$, ou encore par

$$\mathbf{D}^{vp} = \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}_0^{(k)} \left(\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \right)^n \text{sign}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}) \boldsymbol{\mu}^{(k)}. \quad (8.2)$$

Dans ses travaux, Han (2012) préfère relier les contraintes aux taux de déformations viscoplastiques par

$$\mathbf{D}^{vp} = \sum_{k=1}^K \left\{ \frac{|\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}| - \tau_c^{(k)}}{K_0} \right\}^n \text{sign}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}) \boldsymbol{\mu}^{(k)} \quad (8.3)$$

où $\tau_c^{(k)}$ est la cission critique du système k et où K_0 et n sont les paramètres de viscosité. En général, la relation (8.2) est préférée dans les approches variationnelles pour sa régularité tandis que la relation (8.3) est employée dans des démarches phénoménologiques. Les deux fonctions ont néanmoins quelques caractéristiques communes. En plasticité, lorsque $n \rightarrow \infty$, les deux expressions dérivent toutes deux d'un potentiel qui est la fonction indicatrice du domaine de résistance \mathcal{P} du cristal (voir l'expression (2.12)). De plus, lorsque n est suffisamment grand (pour $n = 15$ par exemple), les déformations viscoplastiques évaluées en (8.2) et (8.3) sont très similaires.

Modèle cristallin pour un acier inoxydable austénitique irradié par Han (2012)

Les modèles de Han (2012) sont à l'origine proposés dans le cadre des grandes déformations mais ils sont facilement transposables pour de petites perturbations mécaniques. Les taux de contraintes sont reliés aux taux de déformations élastiques par

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbb{C} \cdot (\mathbf{D} - \mathbf{D}^{vp}). \quad (8.4)$$

Les taux de déformation viscoplastiques sont évalués par (8.3). Les aciers inoxydables austénitiques présentent une structure cristalline de type cubique à faces centrées. L'expression (8.3) peut alors s'écrire

$$\mathbf{D}^{vp} = \sum_{k=1}^{12} \dot{\gamma}^{(k)} \boldsymbol{\mu}^{(k)} \quad (8.5)$$

où

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \left\{ \frac{|\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}| - \tau_c^{(k)}}{K_0} \right\}^n \text{sign}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}) \quad (8.6)$$

décrit un écrouissage isotrope. La dernière expression est un cas particulier du modèle développé par [Cailletaud \(1992\)](#). Le dernier modèle proposé par [Han \(2012\)](#) (modèle issu de la stratégie dite « stratégie 3 ») est utilisé ici. Il intègre les mécanismes responsables du durcissement d'irradiation présentés dans le premier chapitre. La cission critique $\tau_c^{(k)}$ n'est ici plus vue comme un paramètre mais comme une variable dépendant de l'évolution des dislocations et des boucles de dislocation. Elle évolue via

$$\tau_c^{(k)} = \underbrace{\tau_0}_1 + \underbrace{\tau_a e^{-|\dot{\gamma}^{(k)}|/\gamma_0}}_2 + \underbrace{\mu \left(\sqrt{\sum_{u=1}^{12} a^{(k,u)} r_D^{(u)}} \right)}_3 + \underbrace{\alpha_L \sqrt{\sum_{p=1}^4 r_L^{(p)}}}_4. \quad (8.7)$$

Le terme de contribution des dislocations au durcissement (terme 3) dérive de modèles phénoménologiques exposés dans [Franciosi \(1985\)](#). Le terme de contribution des boucles de dislocations au durcissement (terme 4) est fréquemment utilisé dans la littérature (voir [Pokor et al. \(2004a,b,c\)](#)). Ce modèle est dit de type « somme des racines » car les deux mécanismes de durcissement dus aux dislocations et aux boucles de dislocations sont placés sous une forme additive dans l'expression de la cission critique $\tau_c^{(k)}$ (termes 3 et 4 dans (8.7)). Ici, τ_0 est une contrainte dite de friction due au réseau cristallin (qui dépend de la température). Dans le terme 3 de (8.7), μ est le module de cisaillement, $r_D^{(u)}$ est la densité de dislocation normalisée sur le système de glissement u et $a^{(k,u)}$ est une matrice 12×12 représentant l'interaction entre les dislocations. À l'état irradié, un durcissement supplémentaire, dû aux boucles de dislocations, est modélisé par le terme 4 de (8.7) où $r_L^{(p)}$ est la densité normalisée des boucles de dislocations dans le plan p et α_L est un coefficient appelé « force d'obstacle effective des boucles de dislocations ». Afin de prendre en compte un effet d'ancrage des dislocations décrivant phénoménologiquement le mécanisme dit de « durcissement par blocage des sources induit par cascades » un terme supplémentaire a été proposé par [Han \(2012\)](#) (terme 2 de (8.7)) : ce terme phénoménologique introduit une contrainte de cisaillement appelée τ_a et un glissement de référence appelé γ_0 qui sert à régler la vitesse d'avalanche après le désancrage des dislocations. L'évolution des densités de dislocation et des densités de boucles de dislocation est modélisée via

$$\dot{r}_D^{(k)} = \left(\frac{1}{\kappa} \left(\underbrace{\sqrt{\sum_{u=1}^{12} b^{(k,u)} r_D^{(u)}}}_5 + \underbrace{\sqrt{K_{dl} \sum_{p=1}^4 r_L^{(p)}}}_6 \right) - \underbrace{G_c r_D^{(k)}}_7 \right) |\dot{\gamma}^{(k)}| \quad (8.8)$$

et

$$\dot{r}_L^{(p)} = A_L \underbrace{\left(r_L^{sat} - r_L^{(p)} \right)}_8 \sum_{k \in \text{plan}(p)} |\dot{\gamma}^{(k)}| \underbrace{\sum_{k \in \text{plan}(p)} r_D^{(k)}}_9. \quad (8.9)$$

où $b^{(k,u)}$ est une matrice d'interaction entre dislocations (même forme que $a^{(k,u)}$). L'évolution des densités de dislocations contient deux termes de multiplication (termes 5 et 6 de (8.8)) dont un est dû à l'irradiation (terme 6 de (8.8)) et un terme d'annihilation (terme 7 de (8.8)). La relation d'évolution concernant les dislocations dérive de modèles classiques en micromécanique (voir [Han \(2012\)](#) et références incluses). La relation d'évolution concernant les boucles de dislocation, moins consensuelle, est inspirée des travaux de [Krishna et al. \(2010\)](#); [Krishna et De \(2011\)](#). Puisque le balayage des boucles par les dislocations mobiles est effectif dans le plan des boucles, seulement le glissement dans ce plan peut contribuer à l'évolution de la densité de boucles de dislocations (d'où $k \in \text{plan}(p)$ dans (8.9)). La signification globale des principaux termes de la loi de comportement cristalline viscoplastique de [Han \(2012\)](#) telle qu'exposée ici ainsi que les variables et les paramètres sont synthétisés et listés ci-dessous.

Signification des principaux termes des équations de comportement du modèle de Han (2012)

- 1 cission nécessaire pour frictionner le réseau cristallin
- 2 mécanisme de durcissement/d'adoucissement par ancrage/désancrage des dislocations (effet d'avalanche)
- 3 mécanisme de durcissement par les dislocations
- 4 mécanisme de durcissement par les boucles de dislocation
- 5 mécanisme de multiplication des dislocations par interaction entre dislocations
- 6 mécanisme de multiplication des dislocations par interaction entre dislocations et boucles de dislocations
- 7 mécanisme d'annihilation des dislocations
- 8 mécanisme d'évolution des boucles de dislocation jusqu'à saturation
- 9 mécanisme d'interaction entre boucles de dislocations et dislocations

Variables du modèle de Han (2012)

- σ tenseur des contraintes
- $\gamma^{(k)}$ glissement sur le système de glissement k
- $r_D^{(k)}$ densité normalisée des dislocations sur le système de glissement k
- $r_L^{(p)}$ densité normalisée des boucles de dislocation (L pour « Loop ») dans le plan de glissement p

Paramètres du modèle de Han (2012)

- n exposant de viscosité
- K_0 paramètre de viscosité
- τ_0 friction du réseau cristallin (dépend de la température)
- τ_a cission nécessaire pour débloquer les dislocations (dépend de la dose d'irradiation)
- γ_0 glissement de référence (réglage de la vitesse d'avalanche après le désancrage des dislocations)
- μ module de cisaillement
- $a^{(k,u)}$ coefficient d'interaction entre les systèmes de glissement k et u , stocké dans la matrice \mathbf{a}
- α_L force d'obstacle des boucles de dislocation
- κ facteur de proportionnalité lié au nombre d'obstacles franchis par un défaut
- $b^{(k,u)}$ coefficient d'interaction entre les systèmes de glissement k et u , stocké dans la matrice \mathbf{b}
- K_{dl} coefficient d'interaction entre dislocations et boucles de dislocation
- G_c facteur de proportionnalité lié au mécanisme d'annihilation des dislocations
- A_L aire d'annihilation des boucles de dislocation
- r_L^{sat} densité normalisée stabilisée des boucles de dislocation à la saturation

Les différents paramètres du modèle et les variables à l'état initial ont été identifiés par Han (2012) notamment pour un acier SA304L irradié à 13 dpa et 330 °C et testé à une température de 330 °C. Leurs valeurs sont répertoriées dans l'annexe E section 2. Dans la suite de ce travail, des valeurs différentes de celles proposées par Han (2012) sont utilisées pour les paramètres γ_0 (glissement de référence dans le terme phénoménologique d'avalanche) et τ_0 (friction du réseau cristallin) : en suivant les résultats de l'étude numérique de Vincent (2018), γ_0 est fixé à 0.5 (au lieu de 0.05 dans Han (2012)) et τ_0 est fixé à 58 MPa (au lieu de 88 MPa dans Han (2012)). On note qu'augmenter γ_0 permet de diminuer la vitesse d'avalanche. Après avoir modifié la valeur de γ_0 , le paramètre τ_0 a été identifié dans cette étude numérique de Vincent (2018) afin de retrouver par simulation

numérique FFT sur polycristal dense la contrainte maximale en traction obtenue expérimentalement par les essais de tractions de Pokor (voir Han (2012)) sur un acier SA304L irradié à 13 dpa à la température de 330 ° C et testé à 330 ° C à une vitesse de déformation de $3 \cdot 10^{-4}$ /s. Cette étude numérique sur ce cas de traction simple a montré qu'augmenter γ_0 permet d'obtenir une meilleure convergence en terme de discrétisation du polycristal dense (nombre de voxels) et permet d'utiliser des pas de temps plus importants dans la simulation. En revanche, cela a pour effet de lisser le pic proche de la limite d'élasticité sur les courbes de traction numérique. Une comparaison entre simulations FFT avec CraFT sur un polycristal dense et des courbes de traction expérimentales est effectuée dans la section 3.

Intégration du modèle cristallin

Les expressions (8.4) à (8.9) forment un système d'équations différentielles fortement non-linéaires de type $\dot{\mathbf{Y}} = F(\mathbf{Y}, \mathbf{D})$ où \mathbf{Y} regroupe les variables $\boldsymbol{\sigma}$, $\gamma^{(k)}$, $r_D^{(k)}$ et $r_L^{(p)}$. Le système de 34 équations à 34 inconnues est intégré en temps par la méthode numérique implicite de Newton-Raphson où la matrice jacobienne est calculée analytiquement. L'annexe D section 2 détaille la méthode et la matrice jacobienne.

3 Propriétés effectives d'un acier inoxydable austénitique irradié

L'acier inoxydable austénitique irradié de type SA304L est maintenant modélisé comme un polycristal dense dont le comportement local obéit à la loi de Han (2012) telle que présentée dans la section 2. La réponse de la microstructure est évaluée par simulations numériques avec le code de calcul CraFT. On cherche ici à montrer qu'une cellule unitaire composée de 512 grains et discrétisée par 256^3 voxels permet d'obtenir une réponse macroscopique offrant un bon compromis entre précision et temps de calcul.

Génération des microstructures

On considère deux cellules unitaires représentatives de polycristaux denses (sans cavités) où la forme des grains est déterminée par un procédé de pavage de Voronoï. Les deux cellules unitaires diffèrent par le nombre de grains qu'elles contiennent. L'une compte 512 grains, l'autre en compte 4096 (voir figure 8.1).

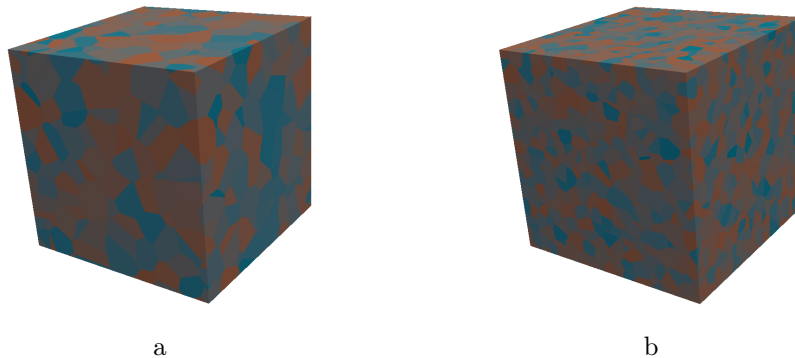


FIGURE 8.1 – Cellules unitaires périodiques représentatives de polycristaux denses. a : Polycristal comptant 512 grains. b : Polycristal comptant 4096 grains.

Les cellules unitaires générées sont par la suite discrétisées en une grille régulière de voxels. Une loi de comportement est assignée à chaque voxel, selon sa position dans la cellule unitaire. La loi de comportement correspond au modèle de Han (2012) présenté dans la section 2. L'orientation de chaque grain est choisie aléatoirement.

Étude du nombre de grains et de la discrétisation des microstructures

Le principal paramètre influençant la convergence des résultats FFT est le nombre de voxels décrivant chaque grain. Pour choisir le nombre de voxels par grains, des simulations FFT ont été menées pour différents degrés de discrétisation (256^3 et 512^3) sur la microstructure contenant 512 grains (voir figure 8.1.a). Le premier cas correspond à 32^3 voxels par grains et le second à 64^3 voxels par grains (en moyenne) (voir figure 8.2).



FIGURE 8.2 – Coupes des cellules unitaires représentatives du polycristal comptant 512 grains. a : Cellule discrétisée par 256^3 voxels. b : Cellule discrétisée par 512^3 voxels.

La cellule unitaire contenant 4096 grains est discrétisée avec 512^3 voxels (ce qui correspond à 32^3 voxels par grain en moyenne). Les cellules unitaires sont sollicitées en traction simple où la direction de contrainte est imposée et la vitesse de déformation est fixée à $3 \cdot 10^{-4}/s$. Dans le cadre des petites perturbations, les échantillons sont sollicités jusqu'à 3% de déformation dans la direction $e_3 \otimes e_3$ de sorte que $\bar{\sigma} = \bar{\sigma}_0 e_3 \otimes e_3$ et $D_{33} = 3 \cdot 10^{-4}/s$. Les courbes de traction obtenues sont représentées sur la figure 8.3.a.

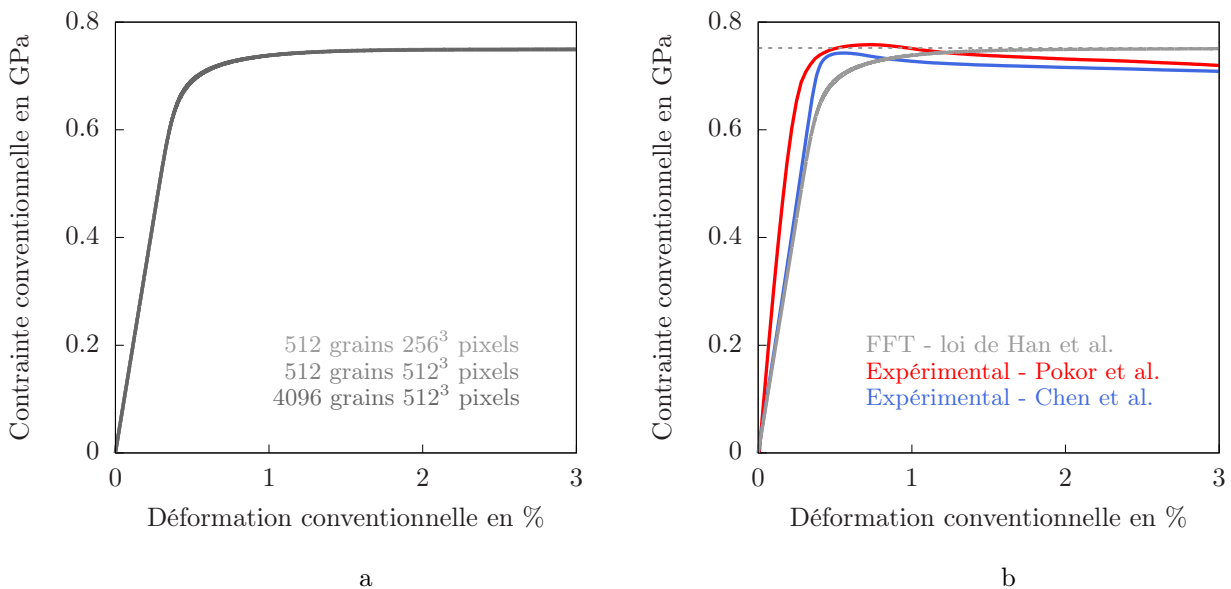


FIGURE 8.3 – a : Étude de l'effet du nombre de grains et du nombre de voxels sur des polycristaux dont le comportement cristallin obéit à la loi de Han (2012) (les trois courbes sont confondues). b : Comparaison avec l'essai de Pokor (Han, 2012) sur un acier SA304L irradié à 13 dpa à 330°C et déformé à une vitesse de $3 \cdot 10^{-4}/s$ et avec l'essai de Chen *et al.* (2014) sur un acier SA304L irradié à 10 dpa à 315°C et déformé à une vitesse de $7.4 \cdot 10^{-7}/s$.

La figure 8.3.a suggère qu'une cellule unitaire comprenant 512 grains et discrétisée avec 256^3 pixels (où chaque grain est discrétisé par environ 32^3 voxels) fournit un compromis raisonnable entre précision et performance

numérique. Aussi, le fait que pour deux microstructures où le nombre de grains varie (discrétisation en voxels par grain identique pour les deux microstructures) et donc où l'arrangement des cristaux diffère, la réponse des deux polycristaux soit identique, indique que les nombres de grains choisis sont suffisamment élevés dans les deux cas pour permettre la réponse effective isotrope attendue pour un polycristal.

La comparaison entre la réponse de la cellule unitaire comprenant 512 grains et discrétisée avec 256^3 voxels et l'essai de Pokor (voir Han (2012)) sur un acier irradié à 13 dpa à 330°C pour une vitesse de déformation de $3 \cdot 10^{-4}/\text{s}$ indique que les simulations numériques avec la loi de Han permettent de retrouver la contrainte maximale (figure 8.3.b). L'adoucissement post pic n'est pas reproduit précisément par les simulations car le paramètre γ_0 (glissement de référence dans le terme d'avalanche) du modèle de Han a volontairement été augmenté par soucis de convergence. Un bon accord est également observé avec la courbe de traction expérimentale de Chen *et al.* (2014) (voir figure 8.3.b).

Identification d'une cission de référence

On cherche maintenant à faire correspondre la contrainte maximale d'une microstructure polycristalline dense dont le comportement local dérive d'une loi puissance (8.1) où $\tau_0^{(k)} = \tau_0 \forall k$ et $\dot{\gamma}_0^{(k)} = 1/s \forall k$ avec la contrainte maximale de la même microstructure dont le comportement local est décrit par la loi de Han telle que présentée dans la section 2. Plus précisément, on se propose d'identifier la cission τ_0 d'un polycristal en loi puissance pour faire correspondre la contrainte maximale avec celle obtenue par la loi de Han. Le paramètre de viscosité a été fixé à $n = 15$. On effectue deux simulations numériques de l'essai de traction ($\bar{\sigma}_0 = e_{33} \otimes e_{33}$ et $\bar{D}_{33} = 3 \cdot 10^{-4}/\text{s}$) sur la même microstructure comprenant 512 grains (montrée sur la figure 8.1.a) et discrétisée avec 256^3 voxels (montré sur la figure 8.2.a).

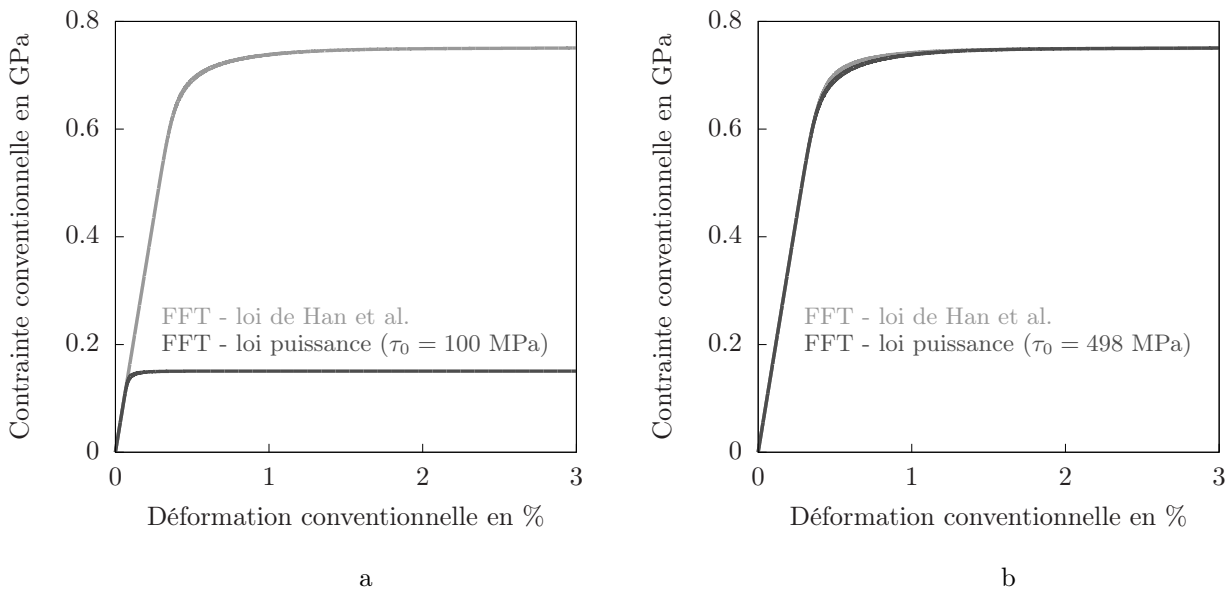


FIGURE 8.4 – Identification de la cission de référence τ_0 pour un acier inoxydable austénitique irradié dont le comportement est décrit par la loi de Han. Simulation d'un test de traction sur un polycristal dense (512 grains et 256^3 voxels). a : Comparaison entre simulations avec deux lois cristallines : la loi de Han et la loi puissance non recalée. b : Comparaison entre simulations avec deux lois cristallines : la loi de Han et la loi puissance recalée.

Le paramètre τ_0 est fixé à 100 MPa pour le polycristal dense en loi puissance. Le paramètre τ_0 est ensuite identifié grâce à une simple relation de proportionnalité entre le paramètre τ_0 et la contrainte maximale relatifs

à la simulation numérique avec la loi puissance d'un côté, et avec la contrainte maximale relative à la simulation numérique avec la loi de Han de l'autre côté (voir figure 8.4.a). Le τ_0 identifié équivaut à 498 MPa. Une simulation numérique avec ce nouveau paramètre ajusté et la loi puissance confirme que le paramètre a bien été identifié (voir figure 8.4.b).

4 Propriétés effectives d'un acier inoxydable austénitique fortement irradié

L'acier inoxydable austénitique de type SA304L fortement irradié, où il est supposé qu'il y a eu saturation des mécanismes de durcissement dus à l'irradiation et qu'il y a potentiellement la présence de larges cavités, est modélisé comme un polycristal dense dont le comportement local dérive d'une estimation pour monocristal poreux. Ici, c'est la surface de jauge de type (Leblond *et al.*, 1994) recalée sur les laminés pour le point hydrostatique, présentée dans la chapitre 3 section 6, qui est choisie (pour sa simplicité et sa précision) pour décrire le comportement viscoplastique d'un monocristal poreux. Le modèle LPS est implémenté dans le code de calcul CraFT, comme détaillé dans l'annexe D section 3. Les simulations avec ce modèle sont réalisées sur un fcc avec les paramètres n et τ_0 identifiés à la section 3.

Propriétés à l'échelle du grain

Les résultats FFT obtenus avec la loi de comportement dérivant de la surface de jauge pour $f = 0.01$ sur une cellule unitaire homogène de 2^3 voxels représentative d'un monocristal sont comparés avec des simulations FFT sur un monocristal poreux ($f = 0.01$) décrit par une cellule unitaire (voir figure 5.2.a) discrétisée par 256^3 voxels où la matrice suit la loi de Han (2012). Les cellules sont sollicitées par une direction de contrainte macroscopique axisymétrique de type $\bar{\sigma}_0 = \bar{\sigma}_{110}\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \bar{\sigma}_{110}\mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 + \bar{\sigma}_{330}\mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3$ avec $\bar{\sigma}_{110} < \bar{\sigma}_{330}$ et $\bar{\sigma}_{110}\bar{D}_{11} + \bar{\sigma}_{110}\bar{D}_{22} + \bar{\sigma}_{330}\bar{D}_{33} = 3 \cdot 10^{-4}/s$. Les résultats sont présentés sur les figures 8.5 et 8.6.

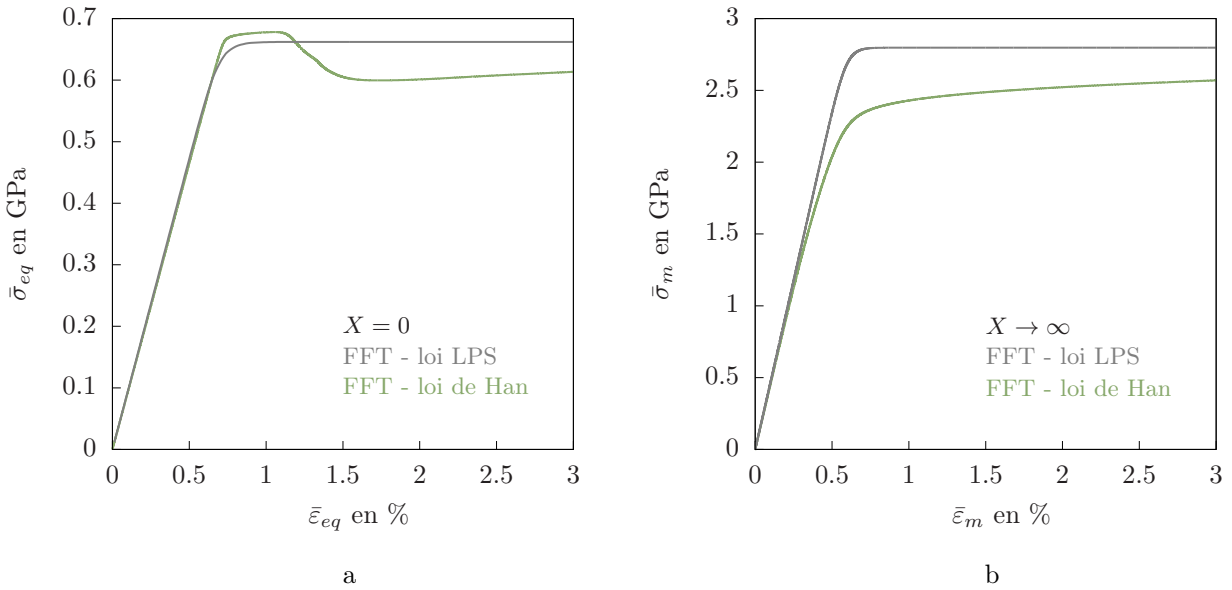


FIGURE 8.5 – Simulations FFT avec la loi de Han (2012) sur cellule cristalline poreuse ($f = 0.01$) et la loi LPS sur cellule homogène ($f = 0.01$). a : Contraintes équivalentes macroscopiques en fonction des déformations équivalentes macroscopiques pour une triaxialité des contraintes nulle. b : Contraintes hydrostatiques macroscopiques en fonction des déformations hydrostatiques macroscopiques pour une triaxialité des contraintes infinie.

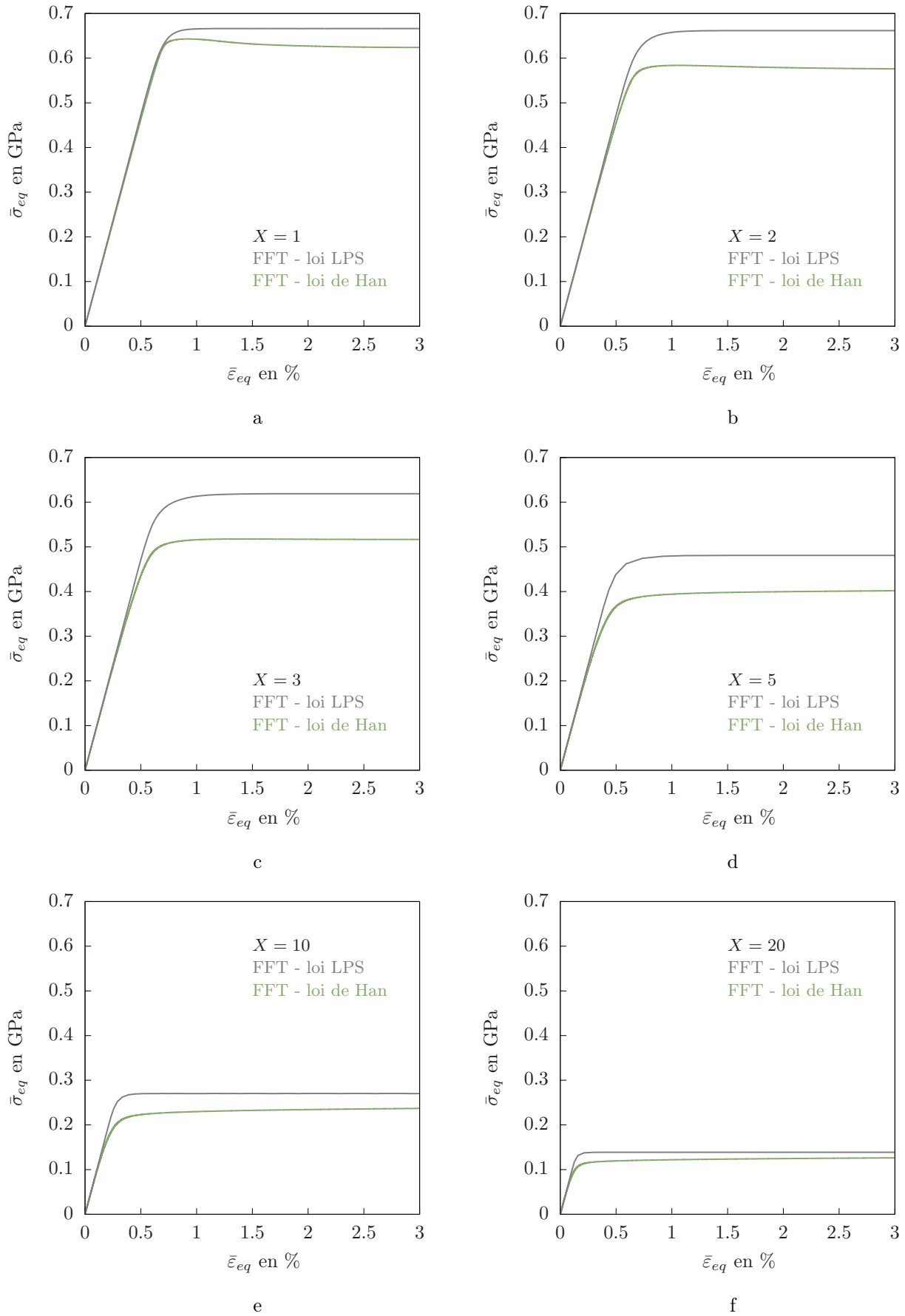


FIGURE 8.6 – Contraintes équivalentes macroscopiques en fonction des déformations équivalentes macroscopiques. Simulations FFT avec la loi de Han (2012) sur cellule cristalline poreuse ($f = 0.01$) et la loi LPS sur cellule homogène ($f = 0.01$) pour différentes triaxialités $X_{\bar{\sigma}} = \bar{\sigma}_m / \bar{\sigma}_{eq}$. a : $X_{\bar{\sigma}} = 1$. b : $X_{\bar{\sigma}} = 2$. c : $X_{\bar{\sigma}} = 3$. d : $X_{\bar{\sigma}} = 5$. e : $X_{\bar{\sigma}} = 10$. f : $X_{\bar{\sigma}} = 20$.

On note des différences entre les deux approches. Néanmoins les mêmes tendances sont obtenues dans l'évaluation des contraintes équivalentes. On note que la cission de référence utilisée dans la loi LPS a été obtenue par identification sur un polycristal dense (voir section 3). Ce paramètre est utilisé pour modéliser la viscoplasticité des polycristaux poreux dans le paragraphe suivant.

Propriétés à l'échelle du polycristal

La structure polycristalline est décrite par une cellule unitaire contenant 512 grains (voir figure 8.1.a) et discrétisée par 256^3 voxels. Localement, le comportement pour chaque pixel est décrit par la surface de jauge pour monocristaux poreux avec le modèle LPS (où la cission de référence correspond à $\tau_0 = 498$ MPa et où l'exposant de viscosité est choisi comme $n = 15$). Les cellules sont sollicitées par une direction de contrainte macroscopique de type traction simple où $\bar{\sigma}_0 = \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3$ avec $\bar{D}_{33} = 3 \cdot 10^{-4}/s$. On compare des résultats expérimentaux de [Neustroev et Garner \(2008\)](#) avec des simulations numériques effectuées pour différentes porosités (0, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.1). La figure ci-dessous représente la contrainte maximale en fonction du gonflement s tel que défini dans ([Neustroev et Garner, 2008](#)), où $s = 100 \cdot f/(1 - f)$. Les simulations sont cohérentes avec les résultats de ces essais menés sur des aciers inoxydables austénitiques russes de type Kh18H10T testés aux températures d'irradiation comprises entre 360°C et 430°C .

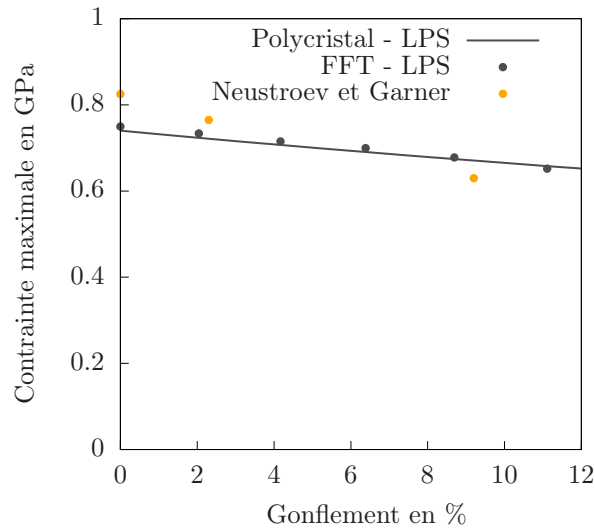


FIGURE 8.7 – Contrainte maximale en fonction du gonflement. Comparaison entre les essais de [Neustroev et Garner \(2008\)](#), simulations numériques sur un polycristal avec la loi LPS dans les grains (essais de traction) et la loi LPS pour polycristal poreux.

5 Conclusion

Ce chapitre a permis d'identifier un jeu de paramètres pour modéliser le comportement d'un acier inoxydable austénitique fortement irradié (présence de cavités) avec l'estimation pour polycristaux poreux proposée dans ce travail. Le comportement des aciers inoxydables austénitiques semble relativement bien reproduit à la vue des comparaisons avec les essais de traction de [Neustroev et Garner \(2008\)](#).

Conclusion et perspectives

De manière générale, ce travail de recherche contribue à la compréhension et à l'appréhension du comportement des milieux cristallins poreux dans le but d'appliquer les résultats à la modélisation du comportement des aciers inoxydables austénitiques irradiés, où des cavités intragranulaires peuvent potentiellement apparaître. Il est rappelé que ce travail s'inscrit dans le cadre de recherches menées à l'IRSN concernant le vieillissement des internes de cuve, principalement faits d'aciers inoxydables austénitiques, et soumis à de fortes doses d'irradiation durant leur exploitation dans la cuve des réacteurs à eau pressurisée.

Bilan des recherches réalisées

Une démarche en deux étapes, par un double changement d'échelles, a été mise en place pour intégrer l'anisotropie cristalline dans un modèle pour polycristaux poreux. De ce fait, la première étape a consisté à isoler un grain du polycristal poreux et à en modéliser le comportement viscoplastique. La deuxième étape a consisté à incorporer le comportement viscoplastique du monocristal poreux dans la structure polycristalline.

Une étude détaillée portant sur la viscoplasticité des monocristaux poreux a permis de développer plusieurs approches pour en modéliser le comportement. Le monocristal poreux a été idéalisé par trois microstructures différentes. Premièrement, le monocristal poreux a été idéalisé comme un assemblage d'une infinité de sphères homothétiques ; deuxièmement, le monocristal poreux a été idéalisé comme une microstructure laminée séquentiellement, dont le procédé de laminage est réitéré à l'infini ; troisièmement, le monocristal poreux a été idéalisé comme une microstructure périodique dont le comportement est évalué par des simulations numériques basées sur un algorithme de transformées de Fourier rapides. De plus la matrice cristalline a été idéalisée par deux approches. Premièrement, la matrice a été idéalisée par un matériau cristallin viscoplastique dont le comportement dérive d'une loi puissance ; deuxièmement, la matrice a été idéalisée par un matériau anisotrope plus rigide dont le comportement dérive d'inégalités de convexités appliquées à une loi puissance. Cette idéalisation a été appliquée sur l'assemblage de sphères creuses. Toutes ces approches ont été déclinées en viscosité linéaire, en plasticité mais aussi pour des cristaux fortement anisotropes. Enfin, une étude détaillée a été proposée pour le cas particulier d'un chargement purement hydrostatique, où généralement les résultats vus dans la littérature diffèrent le plus. L'ensemble des résultats a été validés, généralement avec succès, avec les simulations numériques à base de transformées de Fourier rapide.

Les points forts de chaque modèle développé ont été rassemblés pour construire une surface de jauge de type [Leblond *et al.* \(1994\)](#) permettant de modéliser le comportement d'un monocristal poreux en viscoplasticité de manière purement analytique, tout en garantissant une précision acceptable en vue d'une application aux aciers inoxydables austénitiques irradiés. Concrètement, la surface de jauge proposée reproduit le comportement des laminés pour le point hydrostatique et correspond au comportement de la matrice pure (porosité nulle) pour un chargement purement déviatorique.

À ce stade, l'originalité de ce travail a été d'utiliser les laminés de rang infinis comme microstructure d'étude pour modéliser le comportement de monocristaux poreux en viscoplasticité, notamment en tirant profit de quelques propriétés sur les laminés, comme les propriétés de la solution de l'équation de Hamilton-Jacobi qui régit le comportement de cette microstructure atypique, encore jamais utilisées avant ce jour. Les autres approches développées ont permis de certifier la précision de cette méthode d'une part, et d'autre part d'en tirer profit pour proposer des outils de modélisation présentant un bon compromis entre précision des résultats et simplicité d'utilisation. La philosophie de ce travail a été de proposer une autre approche (les laminés) pour compléter les études proposées par quelques équipes de recherche (Han *et al.*, 2013; Paux *et al.*, 2015; Mbiakop *et al.*, 2015; Song et Ponte Castañeda, 2017a) sur la plasticité ou la viscoplasticité des monocristaux poreux.

Les outils développés dans le cadre de la viscoplasticité des monocristaux poreux ont été appliqués à la viscoplasticité des polycristaux poreux via une démarche de double changement d'échelles. Concrètement, une expression du potentiel effectif caractérisant le comportement viscoplastique d'un polycristal poreux a été proposé en s'inspirant des travaux de Vincent (2007) et de Idiart (2007). Additionnellement, une expression analytique de la surface de jauge d'un polycristal poreux a été proposée. Les deux estimations (potentiel effectif et surface de jauge) correspondent à l'estimation des laminés pour le point hydrostatique et à l'estimation de Liu *et al.* (2003) pour un polycristal dense pour le point déviatorique. Les résultats obtenus avec cette surface de jauge ont été comparés à des simulations FFT sur des microstructures périodiques polycristallines où localement le comportement dérive de la surface de jauge proposée pour des monocristaux poreux viscoplastiques. Un bon accord a été constaté entre les différentes approches.

Enfin, les outils développés pour modéliser la viscoplasticité des polycristaux poreux ont été appliqués à un acier inoxydable austénitique irradié. Dans un premier temps, la loi de Han (2012) spécialement dédiée à un acier inoxydable austénitique irradié a été implémentée dans le code FFT en vue d'identifier une cission de référence relative au matériau d'étude, qui constituait le seul paramètre matériau manquant pour utiliser les outils de modélisation développés dans ce travail. On note que la loi de Han (2012) implémentée dans le code de calcul CraFT a été utilisée par l'IRSN et le LMA dans le cadre du projet européen SOTERIA visant à améliorer la compréhension des phénomènes de vieillissement de matériaux structurels employés dans les réacteurs à eau pressurisée (cuve et internes). Les estimations pour polycristaux poreux, avec la cission de référence identifiée, sont comparées aux résultats expérimentaux de Neustroev et Garner (2008) sur le gonflement des aciers irradiés. Un bon accord est obtenu entre le modèle développé et les essais.

Perspectives

Plusieurs axes d'amélioration de ce travail peuvent être envisagés :

- Extension au cas de cavités ellipsoïdales,
- Évolution de la forme des cavités et de la porosité avec le chargement,
- Évolution des cissions de références selon les systèmes de glissement avec le chargement (écrouissage sur les $\tau_0^{(k)}$).

Ces améliorations pourraient être utilisées pour dériver des estimations pour décrire le comportement viscoplastique de polycristaux poreux avec prise en compte de l'évolution des cavités et des cissions de référence avec le chargement. Sur le plan applicatif, ces estimations pourraient être intégrées dans un code de calcul de

structures pour modéliser le comportement des internes (présentant des géométries complexes) dans la cuve des réacteurs à eau pressurisée, avec prise en compte des effets de durcissement et des cavités dus à de forts niveaux d'irradiation.

La pertinence des résultats obtenus avec la méthode des laminés pourrait inciter à développer de nouveaux modèles (sur la base de cette méthode) pour décrire le comportement viscoplastique de polycristaux avec des lois cristallines complexes comme par exemple celles récemment développées dans la littérature pour des aciers irradiés.

D'une manière plus générale, l'étude proposée sur les laminés, pourrait inciter d'autres équipes de recherche à travailler sur ce type de microstructure, notamment pour des biphasés de type matrice-inclusion où la matrice est anisotrope. De manière directe, la méthode des laminés pourrait servir à recalibrer le point hydrostatique d'estimations postérieures. D'autre part, la démarche de double changement d'échelle, relativement simple à mettre en place, pourrait inspirer de futurs travaux.

Annexe A

Propriétés des monocristaux poreux cubiques

1 Introduction

Cette annexe a pour but de détailler certaines propriétés des monocristaux poreux à symétrie cubique, aussi bien à l'échelle locale qu'à l'échelle macroscopique, où les cavités sont distribuées de manière isotrope. Dans un premier temps, on détaille la géométrie des cristaux de type cubique à faces centrées, cubique centré et ionique. Ensuite, on présente la démarche pour évaluer les propriétés locales des cristaux cubiques dans le cas particulier de la viscosité linéaire. Les principales propriétés d'homogénéités sont démontrées. Enfin, on démontre une propriété effective des monocristaux poreux cubiques sous chargement hydrostatique.

2 Géométrie de quelques cristaux cubiques

En plasticité, le glissement des plans atomiques se produit sur les plans les plus denses et suit les directions les plus denses. Au total, le cristal se déforme plastiquement selon K systèmes de glissement chacun repéré par un vecteur $\mathbf{n}^{(k)}$ normal à un plan de glissement et par une direction de glissement $\mathbf{m}^{(k)}$.

$\mathbf{n}^{(k)}$	(111)			$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$			$(\bar{1}\bar{1}1)$			$(1\bar{1}\bar{1})$		
$\mathbf{m}^{(k)}$	[01 $\bar{1}$]	[10 $\bar{1}$]	[1 $\bar{1}$ 0]	[01 $\bar{1}$]	[101]	[110]	[011]	[101]	[1 $\bar{1}$ 0]	[011]	[10 $\bar{1}$]	[110]

TABLE A.1 – Systèmes de glissement des cristaux cubiques à faces centrées (abrégé par « FCC »)

Famille A												
$\mathbf{n}^{(k)}$	(11 $\bar{1}$)			$(1\bar{1}\bar{1})$			$(1\bar{1}1)$			(111)		
$\mathbf{m}^{(k)}$	[011]	[101]	[1 $\bar{1}$ 0]	[01 $\bar{1}$]	[101]	[110]	[011]	[10 $\bar{1}$]	[110]	[01 $\bar{1}$]	[10 $\bar{1}$]	[1 $\bar{1}$ 0]

Famille B												
$\mathbf{n}^{(k)}$	$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$			$(\bar{1}11)$			$(1\bar{1}1)$			(111)		
$\mathbf{m}^{(k)}$	[$\bar{2}$ 1 $\bar{1}$]	[1 $\bar{2}$ 1]	[112]	[$\bar{2}$ 1 $\bar{1}$]	[12 $\bar{1}$]	[1 $\bar{1}$ 2]	[21 $\bar{1}$]	[$\bar{1}$ 2 $\bar{1}$]	[$\bar{1}$ 12]	[$\bar{2}$ 1 $\bar{1}$]	[1 $\bar{2}$ 1]	[$\bar{1}$ 12]

TABLE A.2 – Systèmes de glissement des cristaux cubiques centrés (abrégé par « BCC »)

	Famille A						Famille B					
$\mathbf{n}^{(k)}$	(110)	($\bar{1}10$)	(101)	(10 $\bar{1}$)	(011)	(01 $\bar{1}$)	(100)	(010)	(001)			
$\mathbf{m}^{(k)}$	[$\bar{1}\bar{1}0$]	[110]	[10 $\bar{1}$]	[101]	[01 $\bar{1}$]	[011]	[011]	[01 $\bar{1}$]	[101]	[10 $\bar{1}$]	[110]	[$\bar{1}\bar{1}0$]

	Famille C											
$\mathbf{n}^{(k)}$	(111)			($\bar{1}\bar{1}1$)			($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)			($\bar{1}\bar{1}1$)		
$\mathbf{m}^{(k)}$	[01 $\bar{1}$]	[10 $\bar{1}$]	[$\bar{1}\bar{1}0$]	[01 $\bar{1}$]	[101]	[110]	[011]	[101]	[$\bar{1}\bar{1}0$]	[011]	[10 $\bar{1}$]	[110]

TABLE A.3 – Systèmes de glissement des cristaux ioniques (abrégé par « IONIC »)

Les trois tables ci-dessus répertorient les vecteurs $\mathbf{n}^{(k)}$ normaux aux plans de glissement et les directions d'écoulement $\mathbf{m}^{(k)}$ de chaque système de glissement pour les trois types de cristaux à symétrie cubique d'étude selon les notations de Schmid et Boas, où la notation $\bar{1}$ correspond à -1 . Les vecteurs $\mathbf{n}^{(k)}$ et $\mathbf{m}^{(k)}$ permettent d'évaluer les tenseurs de Schmid $\boldsymbol{\mu}^{(k)} = \mathbf{n}^{(k)} \otimes_s \mathbf{m}^{(k)}$. Les tenseurs de Schmid permettent de projeter le tenseur des contraintes sur le système de glissement k et de modéliser la direction de l'écoulement plastique.

3 Propriétés locales

En viscosité linéaire, le comportement du cristal est caractérisé par le potentiel en contrainte (2.10) rappelé ici comme

$$u(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\dot{\gamma}_0}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbb{M} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (\text{A.1})$$

où le tenseur $\mathbb{M} = \sum_{k=1}^K 1/\tau_0^{(k)} \boldsymbol{\mu}^{(k)} \otimes \boldsymbol{\mu}^{(k)}$ est incompressible. Les contraintes sont alors reliées aux taux de déformation par la relation linéaire $\mathbf{D} = \dot{\gamma}_0 \mathbb{M} \cdot \boldsymbol{\sigma}$. Ainsi,

$$\mathbf{D} \cdot \mathbb{L} \cdot \mathbf{D} = \dot{\gamma}_0^2 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbb{M} \cdot \mathbb{L} \cdot \mathbb{M} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (\text{A.2})$$

où le tenseur \mathbb{L} est le pseudo inverse de \mathbb{M} tel que $\mathbb{M} \cdot \mathbb{L} \cdot \mathbb{M} = \mathbb{M}$. La fonction $u(\boldsymbol{\sigma})$ est homogène de degré $n+1$ en $\boldsymbol{\sigma}$, donc $\boldsymbol{\sigma} \partial_{\boldsymbol{\sigma}} u(\boldsymbol{\sigma}) = (n+1)u(\boldsymbol{\sigma})$, $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D} = (n+1)u(\boldsymbol{\sigma})$ et $w(\mathbf{D}) = nu(\boldsymbol{\sigma})$. En viscosité linéaire, et pour un matériau incompressible, le potentiel dual prend alors la forme

$$w(\mathbf{D}) = \begin{cases} \frac{1}{2\dot{\gamma}_0} \mathbf{D} \cdot \mathbb{L} \cdot \mathbf{D} & \text{si } \text{tr} \mathbf{D} = 0, \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

Pour des cristaux à symétrie cubique, dans le cas particulier où les propriétés plastiques sont invariantes dans toutes les directions, l'expression du tenseur \mathbb{M} peut se simplifier. Si les cissons critiques $\tau_0^{(k)}$ sont identiques pour tout les systèmes de glissement ($\tau_0^{(k)} = \tau_0 \forall k$), le tenseur $\mathbb{M} = 1/\tau_0 \sum_{k=1}^K \boldsymbol{\mu}^{(k)} \otimes \boldsymbol{\mu}^{(k)}$ a une symétrie cubique et peut s'écrire sous la forme $\mathbb{M} = \gamma \mathbb{J} + \alpha \mathbb{K}_a + \beta \mathbb{K}_b$. Le tenseur \mathbb{J} est un projecteur sur le sous-espace des tenseurs sphériques tandis que le tenseur $\mathbb{K} = \mathbb{K}_a + \mathbb{K}_b$ est un projecteur sur le sous-espace des tenseurs déviatoriques. Les trois coefficients γ , α et β restent à déterminer.

Le tenseur \mathbb{K} peut être défini comme $\mathbb{K} = \mathbb{I} - \mathbb{J}$, où le tenseur \mathbb{I} est associé à l'identité entre tenseurs symétriques du second ordre. Les tenseurs \mathbb{K}_a et \mathbb{K}_b peuvent ainsi être définis comme $\mathbb{K}_a = \mathbb{S} - \mathbb{J}$ et $\mathbb{K}_b = \mathbb{I} - \mathbb{S}$.

Les composantes des tenseurs \mathbb{I} , \mathbb{J} et \mathbb{S} respectent

$$\mathbb{I}_{ijkl} = 1/2 (\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}), \quad (\text{A.4})$$

$$\mathbb{J}_{ijkl} = 1/3\delta_{ij}\delta_{kl}, \quad (\text{A.5})$$

$$\mathbb{S}_{ijkl} = \delta_{ri}\delta_{rj}\delta_{rk}\delta_{rl}. \quad (\text{A.6})$$

De ce fait,

$$\mathbb{I}_{iiii} = 3, \quad \mathbb{I}_{iijj} = 3, \quad \mathbb{I}_{ijij} = 6, \quad (\text{A.7})$$

$$\mathbb{J}_{iiii} = 1, \quad \mathbb{J}_{iijj} = 3, \quad \mathbb{J}_{ijij} = 1, \quad (\text{A.8})$$

$$\mathbb{S}_{iiii} = 3, \quad \mathbb{S}_{iijj} = 3, \quad \mathbb{S}_{ijij} = 3. \quad (\text{A.9})$$

Certaines composantes du tenseur \mathbb{M} peuvent alors être exprimées en fonction de γ , α et β comme

$$\mathbb{M}_{iiii} = \gamma + 2\alpha, \quad (\text{A.10})$$

$$\mathbb{M}_{iijj} = 3\gamma, \quad (\text{A.11})$$

$$\mathbb{M}_{ijij} = \gamma + 2\alpha + 3\beta. \quad (\text{A.12})$$

Donc,

$$\gamma = \frac{1}{3}\mathbb{M}_{iijj}, \quad (\text{A.13})$$

$$\alpha = \frac{1}{2}\mathbb{M}_{iiii} - \frac{1}{6}\mathbb{M}_{iijj}, \quad (\text{A.14})$$

$$\beta = \frac{1}{3}\mathbb{M}_{ijij} - \frac{1}{3}\mathbb{M}_{iiii}. \quad (\text{A.15})$$

D'autre part,

$$\mathbb{M}_{iiii} = 1/\tau_0 \sum_{k=1}^K \boldsymbol{\mu}_{ii}^{(k)} \boldsymbol{\mu}_{ii}^{(k)} = 1/\tau_0 \sum_{k=1}^K \left(\mathbf{n}_i^{(k)} \mathbf{m}_i^{(k)} \right)^2, \quad (\text{A.16})$$

$$\mathbb{M}_{iijj} = 1/\tau_0 \sum_{k=1}^K \boldsymbol{\mu}_{ii}^{(k)} \boldsymbol{\mu}_{jj}^{(k)} = 0, \quad (\text{A.17})$$

$$\mathbb{M}_{ijij} = 1/\tau_0 \sum_{k=1}^K \boldsymbol{\mu}_{ij}^{(k)} \boldsymbol{\mu}_{ij}^{(k)} = 1/\tau_0 \frac{1}{4} \sum_{k=1}^K \left(\left(\mathbf{n}_i^{(k)} \mathbf{m}_j^{(k)} \right)^2 + \left(\mathbf{n}_j^{(k)} \mathbf{m}_i^{(k)} \right)^2 \right). \quad (\text{A.18})$$

Les coefficients γ , α et β peuvent facilement être évalués à partir des deux systèmes d'équations précédents. Pour les cristaux cubiques à faces centrées, $\gamma = 0$, $\alpha = 2/\tau_0$ et $\beta = 2/(3\tau_0)$, pour les cristaux cubiques centrés, $\gamma = 0$, $\alpha = 4/\tau_0$ et $\beta = 4/(3\tau_0)$ et pour les cristaux ioniques, $\gamma = 0$, $\alpha = 7/(2\tau_0)$ et $\beta = 5/(3\tau_0)$.

Alternativement, le fait que le tenseur \mathbb{L} soit défini comme $\mathbb{M} \cdot \mathbb{L} \cdot \mathbb{M} = \mathbb{M}$ implique qu'il ait aussi une symétrie cubique. Il peut alors s'écrire sous la forme $\mathbb{L} = \alpha' \mathbb{K}_a + \beta' \mathbb{K}_b$. Donc, $\alpha \alpha' \alpha = \alpha$, $\beta \beta' \beta = \beta$ et finalement $\mathbb{L} = 1/\alpha \mathbb{K}_a + 1/\beta \mathbb{K}_b$.

4 Propriétés d'homogénéité

Le comportement du cristal est caractérisé par le potentiel en contrainte $u(\boldsymbol{\sigma})$ de type loi puissance, qui a la propriété d'être positivement homogène de degré $n+1$ en $\boldsymbol{\sigma}$. Plus formellement, $u(\lambda \boldsymbol{\sigma}) = |\lambda|^{n+1} u(\boldsymbol{\sigma})$ pour tout

$\lambda \in \mathbb{R}$. Alternativement, le potentiel de dissipation w est lié à u par la transformée de Legendre (2.3) évaluée ici en $\lambda\boldsymbol{\sigma}$ de sorte que

$$w(\mathbf{D}) = \sup_{\lambda\boldsymbol{\sigma}} [\lambda\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D} - u(\lambda\boldsymbol{\sigma})]. \quad (\text{A.19})$$

En optimisant la fonction objective de la dernière expression par rapport à λ (i.e. en posant $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D} - \partial_{\lambda} u(\lambda\boldsymbol{\sigma}) = 0$), la propriété d'homogénéité de u permet de constater que

$$\lambda = \left(\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D}}{(n+1)u(\boldsymbol{\sigma})} \right)^{1/n}. \quad (\text{A.20})$$

En injectant l'expression du λ optimal dans l'expression (A.19), on obtient

$$w(\mathbf{D}) = n \left(\frac{1}{n+1} \right)^{1/n+1} \sup_{\boldsymbol{\sigma}} \left[(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D})^{1+1/n} (u(\boldsymbol{\sigma}))^{-1/n} \right]. \quad (\text{A.21})$$

La dernière expression fait clairement apparaître la propriété d'homogénéité de degré $1 + 1/n$ de w en \mathbf{D} . Plus formellement, $w(\lambda\mathbf{D}) = |\lambda|^{1/n+1} w(\mathbf{D})$ pour tout $\lambda \in \mathbb{R}$.

Le comportement du monocristal poreux est caractérisé par le potentiel effectif en contrainte \tilde{u} défini de manière générale par un principe de minimum d'énergie dissipée (voir par exemple Willis (1989)) comme

$$\tilde{u}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}) = \min_{\boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{S}(\bar{\boldsymbol{\sigma}})} \langle u(\boldsymbol{\sigma}) \rangle_{\Omega} \quad (\text{A.22})$$

où

$$\mathcal{S}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}) = \{ \boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{T} : \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0} \text{ dans } \Omega \wedge \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} = 0 \text{ sur } \partial\Omega \wedge \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \bar{\boldsymbol{\sigma}} \} \quad (\text{A.23})$$

avec \mathbf{n} le vecteur unitaire normal à la frontière du domaine $\partial\Omega$. Pour un champ de contrainte $\boldsymbol{\sigma} = \lambda\mathbf{X}$, en tenant compte de la propriété d'homogénéité de degré $n+1$ en $\boldsymbol{\sigma}$ du potentiel u , le principe variationnel évalué en $\lambda\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ prend la forme

$$\tilde{u}(\lambda\bar{\boldsymbol{\sigma}}) = |\lambda|^{n+1} \min_{\mathbf{X} \in \mathcal{S}(\bar{\boldsymbol{\sigma}})} \langle u(\mathbf{X}) \rangle_{\Omega} \quad (\text{A.24})$$

où

$$\mathcal{S}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}) = \{ \mathbf{X} \in \mathcal{T} : \operatorname{div}(\mathbf{X}) = \mathbf{0} \text{ dans } \Omega \wedge \mathbf{X} \mathbf{n} = 0 \text{ sur } \partial\Omega \wedge \langle \mathbf{X} \rangle = \bar{\boldsymbol{\sigma}} \}. \quad (\text{A.25})$$

De ce fait, le potentiel effectif \tilde{u} hérite de la propriété d'homogénéité du potentiel local u . Plus formellement, $\tilde{u}(\lambda\bar{\boldsymbol{\sigma}}) = |\lambda|^{n+1} \tilde{u}(\bar{\boldsymbol{\sigma}})$.

5 Propriétés effectives

Un monocristal poreux fait d'une matrice cristalline à symétrie cubique où les cavités sont réparties de manière isotrope admet une propriété particulière dans le cas d'un chargement hydrostatique. Dans le cas où le potentiel effectif \tilde{w} caractérisant le comportement de la microstructure a une symétrie cubique, un taux de déformation sphérique $\bar{\mathbf{D}} = \bar{D}_m \mathbf{I}$ provoque une contrainte hydrostatique $\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \bar{\sigma}_m \mathbf{I}$. Pour démonstration, soit \mathbf{Q} une matrice de rotation d'angle $\pm\pi/2$ autour d'un des axes du repère, si le tenseur $\bar{\mathbf{D}}$ respecte $\bar{\mathbf{D}} = \mathbf{Q} \cdot \bar{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{Q}^T$, il est alors admis que $\bar{\mathbf{D}}$ est sphérique ($\bar{\mathbf{D}} = \bar{D}_m \mathbf{I}$). La dérivée de \tilde{w} par rapport à $\bar{\mathbf{D}}$ prend la forme

$$\partial_{\bar{\mathbf{D}}} \tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}) = \mathbf{Q} \cdot \partial_{\bar{\mathbf{D}}} \tilde{w}(\mathbf{Q} \cdot \bar{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{Q}^T) \cdot \mathbf{Q}^T \quad (\text{A.26})$$

équivalente à

$$\partial_{\bar{\mathbf{D}}}\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}_m\mathbf{I}) = \mathbf{Q} \cdot \partial_{\bar{\mathbf{D}}}\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}_m\mathbf{I}) \cdot \mathbf{Q}^T. \quad (\text{A.27})$$

Donc, $\partial_{\bar{\mathbf{D}}}\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}_m\mathbf{I})$ est sphérique et peut être évalué comme

$$\partial_{\bar{\mathbf{D}}}\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}_m\mathbf{I}) = \frac{1}{3}\partial_{\bar{\mathbf{D}}_m}\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}_m\mathbf{I})\mathbf{I} + \mathbb{K} \cdot \partial_{\bar{\mathbf{D}}_d}\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}_m\mathbf{I}) = \frac{1}{3}\partial_{\bar{\mathbf{D}}_m}\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}_m\mathbf{I})\mathbf{I}, \quad (\text{A.28})$$

où \mathbb{K} est le projecteur dans l'espace des tenseurs symétriques et déviatoriques de second ordre. Pour un argument sphérique, la fonction \tilde{u} duale à \tilde{w} est évaluée comme

$$\tilde{u}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}_m\mathbf{I}) = \sup_{\bar{\mathbf{D}}} [3\bar{\mathbf{D}}_m\bar{\boldsymbol{\sigma}}_m - \tilde{w}(\bar{\mathbf{D}})] \geq \sup_{\bar{\mathbf{D}}_m} [3\bar{\mathbf{D}}_m\bar{\boldsymbol{\sigma}}_m - \tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}_m\mathbf{I})]. \quad (\text{A.29})$$

La convexité de \tilde{w} implique l'inégalité $\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}_1) - \tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}_2) \geq \partial_{\bar{\mathbf{D}}}\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}_2) \cdot (\bar{\mathbf{D}}_1 - \bar{\mathbf{D}}_2)$. En choisissant $\bar{\mathbf{D}}_1$ et $\bar{\mathbf{D}}_2$ tels que $\bar{\mathbf{D}}_1 = \bar{\mathbf{D}}_m\mathbf{I} + \bar{\mathbf{D}}_d$ et $\bar{\mathbf{D}}_2 = \bar{\mathbf{D}}_m\mathbf{I}$, et en considérant la propriété (A.28) sur la dérivée de \tilde{w} , l'inégalité de convexité se résume à

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}) \geq \tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}_m\mathbf{I}). \quad (\text{A.30})$$

Alors,

$$\tilde{u}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}_m\mathbf{I}) = \sup_{\bar{\mathbf{D}}} [3\bar{\mathbf{D}}_m\bar{\boldsymbol{\sigma}}_m - \tilde{w}(\bar{\mathbf{D}})] \leq \sup_{\bar{\mathbf{D}}} [3\bar{\mathbf{D}}_m\bar{\boldsymbol{\sigma}}_m - \tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}_m\mathbf{I})] \quad (\text{A.31})$$

et donc, à la vue des expressions (A.29) et (A.31),

$$\tilde{u}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}_m\mathbf{I}) = \sup_{\bar{\mathbf{D}}_m} [3\bar{\mathbf{D}}_m\bar{\boldsymbol{\sigma}}_m - \tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}_m\mathbf{I})]. \quad (\text{A.32})$$

La dernière expression prouve qu'un taux de déformation sphérique $\bar{\mathbf{D}} = \bar{\mathbf{D}}_m\mathbf{I}$ provoque une contrainte hydrostatique $\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \bar{\boldsymbol{\sigma}}_m\mathbf{I}$.

Annexe B

Assemblage de Hashin

1 Introduction

Cette annexe présente certains points techniques sur l'assemblage de sphères creuses. Elle est consacrée essentiellement à la deuxième estimation (nommée *HSA+*) développée dans le document. Dans un premier temps, on apporte des précisions sur les approximations du potentiel local décrivant la matrice cristalline. Ensuite, des précisions sont apportées au développement de l'estimation pour monocristaux poreux. Enfin, il est expliqué comment un critère de plasticité est obtenu avec cette estimation.

2 Propriétés locales

L'une des estimations issues de l'assemblage de Hashin, présentée dans le chapitre 3 section 4, est construite à partir de l'approximation des propriétés locales du cristal via une inégalité de convexité. Le raisonnement est détaillé ici. Le potentiel en contrainte de type loi puissance se prête mieux à certaines applications sous la forme

$$u(\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{k=1}^K \frac{\tau_0^{(k)} \dot{\gamma}_0}{n+1} \left(\frac{\boldsymbol{\sigma}}{\tau_0^{(k)}} \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)} \otimes \boldsymbol{\mu}^{(k)} \cdot \frac{\boldsymbol{\sigma}}{\tau_0^{(k)}} \right)^{(n+1)/2}. \quad (\text{B.1})$$

L'inégalité de convexité $\varphi(\sum_{k=1}^K \lambda_k x_k) \leq \sum_{k=1}^K \lambda_k \varphi(x_k)$, où les réels λ_k respectent $\sum_{k=1}^K \lambda_k = 1$, va permettre de majorer le potentiel en contrainte présenté dans la dernière expression. Les choix de la fonction convexe $\varphi(x) = x^{(n+1)/2}$ et du k -uplet $\lambda^{(k)} = \tau_0^{(k)}/\bar{\tau}_0$ avec $\bar{\tau}_0 = \sum_{k=1}^K \tau_0^{(k)}$ conduisent à une borne supérieure du potentiel en contrainte (B.1) telle que

$$u(\boldsymbol{\sigma}) \geq \frac{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0}{n+1} \left(\frac{1}{\bar{\tau}_0} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbb{M} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right)^{(n+1)/2}. \quad (\text{B.2})$$

En dérivant la dernière expression par rapport à $\boldsymbol{\sigma}$, on obtient une relation entre les contraintes et les taux de déformations telle que

$$\boldsymbol{D} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{1}{\bar{\tau}_0} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbb{M} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right)^{(n-1)/2} \mathbb{M} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (\text{B.3})$$

On peut alors évaluer le produit $\boldsymbol{D} \cdot \mathbb{L} \cdot \boldsymbol{D}$ comme

$$\boldsymbol{D} \cdot \mathbb{L} \cdot \boldsymbol{D} = \dot{\gamma}_0^2 \left(\frac{1}{\bar{\tau}_0} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbb{M} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right)^{n-1} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbb{M} \cdot \mathbb{L} \cdot \mathbb{M} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (\text{B.4})$$

Le tenseur \mathbb{L} est choisi tel que $\mathbb{M} \cdot \mathbb{L} \cdot \mathbb{M} = \mathbb{M}$. L'expression précédente se réécrit

$$\boldsymbol{D} \cdot \mathbb{L} \cdot \boldsymbol{D} = \bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0^2 \left(\frac{1}{\bar{\tau}_0} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbb{M} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right)^n \quad (\text{B.5})$$

et donc,

$$\frac{1}{\bar{\tau}_0} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbb{M} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \left(\frac{1}{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0^2} \mathbf{D} \cdot \mathbb{L} \cdot \mathbf{D} \right)^{1/n}. \quad (\text{B.6})$$

La fonction $u(\boldsymbol{\sigma})$ est homogène de degré $n + 1$ en $\boldsymbol{\sigma}$, donc $\boldsymbol{\sigma} \partial_{\boldsymbol{\sigma}} u(\boldsymbol{\sigma}) = (n + 1)u(\boldsymbol{\sigma})$ et $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D} = (n + 1)u(\boldsymbol{\sigma})$. Le matériau étant incompressible, en injectant la dernière expression dans l'inégalité (B.2), la borne supérieure du potentiel de dissipation $w_+(\mathbf{D}) \geq w(\mathbf{D}) = nu(\boldsymbol{\sigma})$ prend la forme

$$w(\mathbf{D}) \leq w_+(\mathbf{D}) = \begin{cases} \frac{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \left(\frac{1}{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0^2} \mathbf{D} \cdot \mathbb{L} \cdot \mathbf{D} \right)^{(m+1)/2} & \text{si } \text{tr} \mathbf{D} = 0, \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases} \quad (\text{B.7})$$

Si le tenseur \mathbb{M} est de symétrie cubique, il peut s'écrire $\mathbb{M} = \alpha \mathbb{K}_a + \beta \mathbb{K}_b$. Le fait que le tenseur \mathbb{L} soit défini comme $\mathbb{M} \cdot \mathbb{L} \cdot \mathbb{M} = \mathbb{M}$ implique qu'il ait aussi une symétrie cubique. Il peut alors s'écrire sous la forme $\mathbb{L} = \alpha' \mathbb{K}_a + \beta' \mathbb{K}_b$. Donc, $\alpha \alpha' = \alpha$, $\beta \beta' = \beta$ et finalement $\mathbb{L} = 1/\alpha \mathbb{K}_a + 1/\beta \mathbb{K}_b$.

3 Propriétés effectives

L'approche de la sphère creuse, lorsque le comportement de la matrice est caractérisé par le potentiel (B.7), permet d'obtenir une borne supérieure du potentiel effectif de la microstructure rappelée ci-dessous :

$$\tilde{w}_+(\bar{\mathbf{D}}) \leq \frac{1}{(4/3)\pi b^3} \int_S \int_a^b \frac{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \left(\frac{1}{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0^2} \mathbf{D} \cdot \mathbb{L} \cdot \mathbf{D} \right)^{(m+1)/2} r^2 dr dS(\boldsymbol{\xi}). \quad (\text{B.8})$$

L'inégalité de Cauchy-Schwarz $\int \varphi_1 \varphi_2 \leq (\int \varphi_1^p)^{1/p} (\int \varphi_2^q)^{1/q}$ avec $1/p + 1/q = 1$ permet de borner l'intégrale sur S de l'expression précédente comme

$$\int_S \left(\frac{1}{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0^2} \mathbf{D} \cdot \mathbb{L} \cdot \mathbf{D} \right)^{(m+1)/2} dS \leq \left(\int_{\phi} \int_{\theta} \frac{1}{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0^2} \mathbf{D} \cdot \mathbb{L} \cdot \mathbf{D} \sin \theta d\theta d\varphi \right)^{(m+1)/2} \left(\int_{\phi} \int_{\theta} \sin \theta d\theta d\varphi \right)^{(1-m)/2}. \quad (\text{B.9})$$

Avec l'aide de la dernière inégalité, l'expression (B.8) peut être bornée par

$$\tilde{w}_+(\bar{\mathbf{D}}) \leq \frac{1}{(4/3)\pi b^3} \int_a^b (4\pi)^{(1-m)/2} \frac{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \left(\int_S \frac{1}{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0^2} \mathbf{D} \cdot \mathbb{L} \cdot \mathbf{D} dS(\boldsymbol{\xi}) \right)^{(m+1)/2} r^2 dr. \quad (\text{B.10})$$

Le tenseur \mathbf{D} est maintenant choisis comme le taux de déformations de l'expression (3.2) dérivant du champ test de vitesses proposé par Gurson (1977) et présenté dans l'expression (3.1). Donc, le produit $\mathbf{D} \cdot \mathbb{L} \cdot \mathbf{D}$ s'écrit

$$\mathbf{D} \cdot \mathbb{L} \cdot \mathbf{D} = 9\bar{D}_m^2 \frac{b^6}{r^6} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbb{K}_a \cdot \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \bar{\mathbf{D}}_d \cdot \mathbb{L} \cdot \bar{\mathbf{D}}_d - 6\bar{D}_m \frac{b^3}{r^3} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbb{L} \cdot \bar{\mathbf{D}}_d. \quad (\text{B.11})$$

On injecte la dernière expression dans l'inégalité (B.10) puis on évalue les intégrales suivantes :

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbb{K}_a \cdot \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} \sin \theta d\theta d\varphi = \frac{16\pi}{15}, \quad (\text{B.12})$$

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbb{K}_b \cdot \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} \sin \theta d\theta d\varphi = \frac{8\pi}{5}, \quad (\text{B.13})$$

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} \sin \theta d\theta d\varphi = 0. \quad (\text{B.14})$$

Finalement, l'expression (B.10) devient

$$\tilde{w}_+(\bar{\mathbf{D}}) \leq \frac{3}{b^3} \int_a^b \frac{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \left(\frac{1}{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0^2} 9\bar{D}_m^2 \kappa \frac{b^6}{r^6} + \frac{1}{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0^2} \bar{\mathbf{D}}_d \cdot \mathbb{L} \cdot \bar{\mathbf{D}}_d \right)^{(m+1)/2} r^2 dr \quad (\text{B.15})$$

où le coefficient $\kappa = 4/(15\alpha) + 2/(5\beta)$. Le changement de variable $y = r^3/b^3$ où $dy = 3r^2/b^3 dr$ permet de réécrire la dernière expression comme

$$\tilde{w}_+(\bar{\mathbf{D}}) \leq \frac{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0}{m+1} \int_f^1 \left(\frac{1}{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0^2} 9\bar{D}_m^2 \frac{\kappa}{y^2} + \frac{1}{\bar{\tau}_0 \dot{\gamma}_0^2} \bar{\mathbf{D}}_d \cdot \mathbb{L} \cdot \bar{\mathbf{D}}_d \right)^{(m+1)/2} dy. \quad (\text{B.16})$$

La borne obtenue dépend de \bar{D}_m et $\bar{\mathbf{D}}_d$ et constitue une estimation du comportement viscoplastique d'un monocristal poreux.

4 Critère de plasticité

En plasticité (quand $m = 0$), la dernière expression devient

$$\tilde{w}_+(\bar{\mathbf{D}}) \leq \bar{\tau}_0^{1/2} \int_f^1 \left(9\bar{D}_m^2 \frac{\kappa}{y^2} + \bar{\mathbf{D}}_d \cdot \mathbb{L} \cdot \bar{\mathbf{D}}_d \right)^{1/2} dy. \quad (\text{B.17})$$

et peut se réécrire

$$\tilde{w}_+(\bar{\mathbf{D}}) \leq \tau_0 \int_f^1 \left(9\bar{D}_m^2 \frac{\kappa^*}{y^2} + \bar{\mathbf{D}}_d \cdot \mathbb{L}^* \cdot \bar{\mathbf{D}}_d \right)^{1/2} dy \quad (\text{B.18})$$

où les termes sans dimension κ^* et \mathbb{L}^* sont définis tels que $\kappa^* = K/\tau_0 \kappa$ et $\mathbb{L}^* = K/\tau_0 \mathbb{L}$. On cherche à construire une surface paramétrée (i.e. une surface de résistance) à partir de la dernière expression, notamment en dérivant $\tilde{w}_+(\bar{\mathbf{D}})$ par rapport à \bar{D}_m et $\bar{\mathbf{D}}_d$. On obtient rapidement

$$\frac{1}{\sqrt{\kappa^*}} \frac{\bar{\sigma}_m}{\tau_0} = \int_f^1 \frac{1}{y^2} \left(\frac{9\bar{D}_m^2 \kappa^*}{9\bar{D}_m^2 \frac{\kappa^*}{y^2} + \bar{\mathbf{D}}_d \cdot \mathbb{L}^* \cdot \bar{\mathbf{D}}_d} \right)^{1/2} dy, \quad (\text{B.19})$$

$$\left(\frac{\bar{\sigma}_d}{\tau_0} \cdot \mathbb{M}^* \cdot \frac{\bar{\sigma}_d}{\tau_0} \right)^{1/2} = \int_f^1 \left(\frac{\bar{\mathbf{D}}_d \cdot \mathbb{L}^* \cdot \bar{\mathbf{D}}_d}{9\bar{D}_m^2 \frac{\kappa^*}{y^2} + \bar{\mathbf{D}}_d \cdot \mathbb{L}^* \cdot \bar{\mathbf{D}}_d} \right)^{1/2} dy \quad (\text{B.20})$$

où $\mathbb{M}^* = \tau_0/K\mathbb{M}$ est sans dimension. En considérant le rapport $\psi = \bar{D}_m/\sqrt{\bar{\mathbf{D}}_d \cdot \mathbb{L}^* \cdot \bar{\mathbf{D}}_d}$, les deux dernières expressions peuvent se réécrire comme

$$\frac{1}{\sqrt{\kappa^*}} \frac{\bar{\sigma}_m}{\tau_0} = \int_f^1 \frac{1}{y^2 \sqrt{\frac{1}{y^2} + \frac{1}{9\psi^2 \kappa^*}}} dy, \quad (\text{B.21})$$

$$\left(\frac{\bar{\sigma}_d}{\tau_0} \cdot \mathbb{M}^* \cdot \frac{\bar{\sigma}_d}{\tau_0} \right)^{1/2} = \int_f^1 \frac{1}{\sqrt{9\psi^2 \frac{\kappa^*}{y^2} + 1}} dy. \quad (\text{B.22})$$

Dans le but d'intégrer les deux dernières equations, on considère deux changements de variables. L'un défini par $z = y^2$, l'autre par $z = 1/y$. Une fois intégrées, les deux dernières expressions prennent la forme

$$\frac{1}{\sqrt{\kappa^*}} \frac{\bar{\sigma}_m}{\tau_0} = \ln \left(\frac{1}{f} + \sqrt{\frac{1}{f^2} + \frac{1}{9\psi^2 \kappa^*}} \right) - \ln \left(1 + \sqrt{1 + \frac{1}{9\psi^2 \kappa^*}} \right), \quad (\text{B.23})$$

$$\left(\frac{\bar{\sigma}_d}{\tau_0} \cdot \mathbb{M}^* \cdot \frac{\bar{\sigma}_d}{\tau_0} \right)^{1/2} = \sqrt{1 + 9\psi^2 \kappa^*} - \sqrt{f^2 + 9\psi^2 \kappa^*}. \quad (\text{B.24})$$

Par calcul direct, on peut déduire que

$$2 \cosh \left(\frac{1}{\sqrt{\kappa^*}} \frac{\bar{\sigma}_m}{\tau_0} \right) = -\frac{1}{f} \left(9\psi^2 \kappa^* + 9\psi^2 \kappa^* - 2\sqrt{9\psi^2 \kappa^* + 1} \sqrt{9\psi^2 \kappa^* + f^2} \right), \quad (\text{B.25})$$

$$\frac{\bar{\sigma}_d}{\tau_0} \cdot \mathbb{M}^* \cdot \frac{\bar{\sigma}_d}{\tau_0} = 1 + f^2 + 9\psi^2 \kappa^* + 9\psi^2 \kappa^* - 2\sqrt{1 + 9\psi^2 \kappa^*} \sqrt{f^2 + 9\psi^2 \kappa^*}. \quad (\text{B.26})$$

Finalement, le critère de plasticité prend la forme

$$\frac{\bar{\sigma}_d}{\tau_0} \cdot \mathbb{M}^* \cdot \frac{\bar{\sigma}_d}{\tau_0} + 2f \cosh \left(\frac{1}{\sqrt{\kappa^*}} \frac{\bar{\sigma}_m}{\tau_0} \right) - 1 - f^2 = 0. \quad (\text{B.27})$$

Annexe C

Laminés de rang infini

1 Introduction

Cette annexe présente certains points techniques sur les laminés de rang infini, notamment lorsque la matrice du laminé est faite d'un matériau incompressible. Dans le cas particulier d'une matrice cristalline à symétrie cubique, l'annexe présente comment déterminer le potentiel effectif du modèle. Enfin, l'annexe détaille quelques développements concernant l'étude d'un chargement hydrostatique.

2 Matériaux incompressibles

De récents travaux de Idiart sur les propriétés de la solution de l'équation de Hamilton-Jacobi (4.3) pour un laminé de rang infini à phase inclusionnaire vide ont permis d'aboutir à une expression généralisée du potentiel effectif solution \hat{w} telle que

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}, t) = \min_{\mathbf{d} \in \mathcal{D}(t)} \min_{\mathbf{a} \in \mathcal{A}(\dot{\mathbf{d}})} \int_0^t \langle w(\bar{\mathbf{D}} + \mathbf{d} + \mathbf{a} \otimes_s \boldsymbol{\xi}) \rangle e^{-(t-\tau)} d\tau \quad (\text{C.1})$$

où

$$\mathcal{D}(t) = \{\mathbf{d}(\tau) \in \mathcal{T} : \mathbf{d}(t) = \mathbf{0}\} \quad (\text{C.2})$$

et où

$$\mathcal{A}(\dot{\mathbf{d}}) = \{\mathbf{a}(\boldsymbol{\xi}) : \langle \mathbf{a} \otimes_s \boldsymbol{\xi} \rangle = \dot{\mathbf{d}}\}. \quad (\text{C.3})$$

Pour une matrice incompressible, le potentiel w dans l'expression (C.1) caractérise une réponse incompressible du matériau et la trace de son argument est nulle :

$$\text{tr}(\bar{\mathbf{D}} + \mathbf{d} + \mathbf{a} \otimes_s \boldsymbol{\xi}) = 0. \quad (\text{C.4})$$

Le vecteur \mathbf{a} peut alors être décomposé en une partie portée par $\boldsymbol{\xi}$ et en une autre partie orthogonale à $\boldsymbol{\xi}$ notée \mathbf{a}_\perp tel que

$$\mathbf{a} = -\text{tr}(\bar{\mathbf{D}} + \mathbf{d}) \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp. \quad (\text{C.5})$$

Conformément à l'expression (C.5), la moyenne orientationnelle sur la sphère unité de $\mathbf{a} \otimes_s \boldsymbol{\xi}$ donne

$$\langle \mathbf{a} \otimes_s \boldsymbol{\xi} \rangle = -\text{tr}(\bar{\mathbf{D}} + \mathbf{d}) \langle \boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi} \rangle + \langle \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi} \rangle. \quad (\text{C.6})$$

La condition $\langle \mathbf{a} \otimes_s \boldsymbol{\xi} \rangle = \dot{\mathbf{d}}$ énoncée par l'expression (C.3), le calcul $\langle \boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi} \rangle = 1/3\mathbf{I}$ et l'orthogonalité entre \mathbf{a}_\perp et $\boldsymbol{\xi}$ permettent d'établir l'équation différentielle

$$\text{tr} \dot{\mathbf{d}} = -\text{tr} \mathbf{d} - \text{tr} \bar{\mathbf{D}}, \quad \text{tr} \mathbf{d}(t) = \mathbf{0} \quad (\text{C.7})$$

où la condition initiale découle de la condition $\mathbf{d}(t) = \mathbf{0}$ donné par l'expression (C.2). La solution de cette équation différentielle est

$$\text{tr} \mathbf{d} = \text{tr} \bar{\mathbf{D}} e^{t-\tau} - \text{tr} \bar{\mathbf{D}}. \quad (\text{C.8})$$

L'expression (C.5) peut alors être exemptée de la dépendance en \mathbf{d} en considérant l'expression (C.8) de sorte que

$$\mathbf{a} = -\text{tr} \bar{\mathbf{D}} e^{t-\tau} \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp. \quad (\text{C.9})$$

Donc,

$$\mathbf{a} \otimes_s \boldsymbol{\xi} = -\text{tr} \bar{\mathbf{D}} e^{t-\tau} \boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}. \quad (\text{C.10})$$

Les expressions (C.8) et (C.10), le constat $\boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi} = 1/3\mathbf{I} + \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi}$ conduisent à la solution exacte de l'équation de Hamilton-Jacobi pour une matrice incompressible telle que

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}, t) = \min_{\mathbf{d}_d \in \mathcal{D}_d(t)} \min_{\mathbf{a}_\perp \in \mathcal{A}_\perp(\dot{\mathbf{d}}_d)} \int_0^t \langle w(\bar{\mathbf{D}}_d + \mathbf{d}_d - 3\bar{\mathbf{D}}_m e^{t-\tau} \boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) \rangle e^{-(t-\tau)} d\tau \quad (\text{C.11})$$

où

$$\mathcal{D}_d(t) = \{\mathbf{d}_d(\tau) \in \mathcal{T}_d : \mathbf{d}_d(t) = \mathbf{0}\} \quad (\text{C.12})$$

et où l'expression (C.10) et la dérivée de l'expression (C.8) permettent de définir

$$\mathcal{A}_\perp(\dot{\mathbf{d}}_d) = \left\{ \mathbf{a}_\perp(\boldsymbol{\xi}) : \mathbf{a}_\perp \boldsymbol{\xi} = 0 \wedge \langle \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi} \rangle = \dot{\mathbf{d}}_d \right\}. \quad (\text{C.13})$$

3 Cristaux à symétrie cubique

En restreignant l'ensemble des fonctions \mathbf{d}_d à zéro et en imposant $\mathbf{a}_\perp = \mathbf{a}_\perp^H$, la borne supérieure du potentiel effectif de dissipation (C.11) d'un laminé de rang infini à matrice incompressible devient

$$\tilde{w}(\bar{\mathbf{D}}, t) \leq \int_0^t \langle w(\bar{\mathbf{D}}_d - 3\bar{\mathbf{D}}_m e^{t-\tau} (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp^H \otimes_s \boldsymbol{\xi})) \rangle e^{-(t-\tau)} d\tau \quad (\text{C.14})$$

où

$$\mathbf{a}_\perp^H = \arg \min_{\mathbf{a}_\perp \in \mathcal{A}_\perp(\mathbf{0})} \langle w(\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) \rangle. \quad (\text{C.15})$$

Pour une matrice cristalline, cette dernière expression peut se réécrire en fonction du potentiel local en contrainte par la transformée de Legendre comme

$$\mathbf{a}_\perp^H = \arg \min_{\mathbf{a}_\perp \in \mathcal{A}_\perp(\mathbf{0})} \sup_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{T}_d} \left\langle \boldsymbol{\sigma}_d \cdot (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) - \sum_{k=1}^K \frac{\tau_0^{(k)} \dot{\gamma}_0}{n+1} \left| \frac{\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \right|^{n+1} \right\rangle \quad (\text{C.16})$$

où finalement, \mathbf{a}_\perp^H est indépendant de $\dot{\gamma}_0$. En effet, la dernière expression peut se réécrire comme

$$\mathbf{a}_\perp^H = \arg \min_{\mathbf{a}_\perp \in \mathcal{A}_\perp(\mathbf{0})} \dot{\gamma}_0^{-1/n} \sup_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{T}_d} \left\langle \dot{\gamma}_0^{1/n} \boldsymbol{\sigma}_d \cdot (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) - \sum_{k=1}^K \frac{\tau_0^{(k)}}{n+1} \left| \frac{\dot{\gamma}_0^{1/n} \boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \right|^{n+1} \right\rangle \quad (\text{C.17})$$

ou encore comme

$$\mathbf{a}_\perp^H = \arg \min_{\mathbf{a}_\perp \in \mathcal{A}_\perp(\mathbf{0})} \sup_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{T}_d} \left\langle \boldsymbol{\sigma}_d \cdot (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) - \sum_{k=1}^K \frac{\tau_0^{(k)}}{n+1} \left| \frac{\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \right|^{n+1} \right\rangle. \quad (\text{C.18})$$

En appliquant une opération de stationnarité, consistant à évaluer la dérivée partielle de l'argument par rapport à la variable égale à zero, on obtient

$$\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi} = \sum_{k=1}^K \left| \frac{\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \right|^n \text{sign}(\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}) \boldsymbol{\mu}^{(k)}. \quad (\text{C.19})$$

La condition sur l'infimum des \mathbf{a}_\perp stipulant que $\mathbf{a}_\perp \boldsymbol{\xi} = 0$ implique que \mathbf{a}_\perp se décompose dans la base ortho-normale $\{\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, \boldsymbol{\xi}\}$ comme

$$\mathbf{a}_\perp = \lambda_1 \boldsymbol{\xi}_1 + \lambda_2 \boldsymbol{\xi}_2 \quad (\text{C.20})$$

où les coefficients λ_i sont obtenus à partir de (C.19) projetée sur $\boldsymbol{\xi}_i \otimes \boldsymbol{\xi}$ de sorte que

$$\lambda_i = (\boldsymbol{\xi}_i \otimes_s \boldsymbol{\xi}) \cdot (\mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) = \sum_{k=1}^K \left| \frac{\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \right|^n \text{sign}(\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}) (\boldsymbol{\xi}_i \boldsymbol{\mu}^{(k)} \boldsymbol{\xi}). \quad (\text{C.21})$$

D'autre part, en se basant sur l'expression (C.18), un procédé analogue à celui détaillé dans la section suivante permet de définir

$$\boldsymbol{\sigma}_d = \arg \sup_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{T}_\parallel(\boldsymbol{\xi})} \left\{ \boldsymbol{\sigma}_d \cdot (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi}) - \sum_{k=1}^K \frac{\tau_0^{(k)}}{n+1} \left| \frac{\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \right|^{n+1} \right\}. \quad (\text{C.22})$$

Les expressions (C.20), (C.21) et (C.22) permettent d'évaluer \mathbf{a}_\perp^H , et donc d'évaluer à terme le potentiel effectif d'un laminé infini fait d'une matrice cristalline.

4 Chargement hydrostatique

Le comportement de la microstructure sous chargement purement hydrostatique peut être caractérisé par la contrainte d'écoulement hydrostatique $\tilde{\sigma}_h$, présentée en (4.29), et qui dépend d'un coefficient α_{LAM} . En viscoplasticité, le coefficient α_{LAM} prend la forme

$$\alpha_{LAM}(n) = \frac{1+n}{n} \inf_{\mathbf{a}_\perp \in \mathcal{A}_\perp(\boldsymbol{\xi})} \sup_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{T}_d} \left\langle \boldsymbol{\sigma}_d \cdot (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) - \sum_{k=1}^K \frac{\tau_0^{(k)}}{n+1} \left| \frac{\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \right|^{n+1} \right\rangle \quad (\text{C.23})$$

ou encore

$$\alpha_{LAM}(n) = \frac{1+n}{n} \inf_{\mathbf{a}_\perp \in \mathcal{A}_\perp(\boldsymbol{\xi})} \left\langle \boldsymbol{\sigma}_d \cdot (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) - \sum_{k=1}^K \frac{\tau_0^{(k)}}{n+1} \left| \frac{\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \right|^{n+1} \right\rangle \quad (\text{C.24})$$

où $\boldsymbol{\sigma}_d$ correspond ici au champ optimal maximisant l'expression (C.23). En introduisant le multiplicateur de Lagrange, le problème d'optimisation sous contrainte devient une fonction $G(\mathbf{a}_\perp, \lambda)$ à optimiser en \mathbf{a}_\perp et λ définie comme

$$G(\mathbf{a}_\perp, \lambda) = \boldsymbol{\sigma}_d \cdot (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}_\perp \otimes_s \boldsymbol{\xi}) - \sum_{k=1}^K \frac{\tau_0^{(k)}}{n+1} \left| \frac{\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \right|^{n+1} - \lambda \mathbf{a}_\perp \boldsymbol{\xi} \quad (\text{C.25})$$

La condition d'équilibre $\partial_{\mathbf{a}_\perp} G(\mathbf{a}_\perp, \lambda) = 0$ permet d'obtenir la condition $\boldsymbol{\sigma}_d \boldsymbol{\xi} - \lambda \boldsymbol{\xi} = 0$. La condition sur l'infimum des \mathbf{a}_\perp oblige donc $\boldsymbol{\sigma}_d \boldsymbol{\xi}$ à être parallèle à $\boldsymbol{\xi}$. En se basant sur l'expression (C.23), la condition $\boldsymbol{\sigma}_d \boldsymbol{\xi} \parallel \boldsymbol{\xi}$ implique

$$\alpha_{LAM}(n) = \frac{1+n}{n} \sup_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathcal{T}_\parallel(\boldsymbol{\xi})} \left\langle \boldsymbol{\sigma}_d \cdot (\boldsymbol{\xi} \otimes_d \boldsymbol{\xi}) - \sum_{k=1}^K \frac{\tau_0^{(k)}}{n+1} \left| \frac{\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \right|^{n+1} \right\rangle \quad (\text{C.26})$$

puisque σ_d est perpendiculaire à \mathbf{a}_\perp . Pour rappel, $\mathcal{T}_\parallel(\xi) = \{\sigma_d \in \mathcal{T}_d : \sigma_d \xi \parallel \xi\}$. En viscosité linéaire, le coefficient α_{LAM} prend alors la forme

$$\alpha_{LAM}(1) = \sup_{\sigma_d \in \mathcal{T}_\parallel(\xi)} \langle 2\sigma_d \cdot (\xi \otimes_d \xi) - \sigma_d \cdot \mathbb{M} \cdot \sigma_d \rangle. \quad (\text{C.27})$$

En introduisant le multiplicateur de Lagrange, le problème d'optimisation sous contrainte devient une fonction $G(\mathbf{a}_\perp, \lambda_1, \lambda_2)$ à optimiser en \mathbf{a}_\perp , λ_1 et λ_2 définie comme

$$G(\mathbf{a}_\perp, \lambda_1, \lambda_2) = 2\sigma_d \cdot (\xi \otimes_d \xi) - \sigma_d \cdot \mathbb{M} \cdot \sigma_d - \lambda_1 \xi_1 \cdot \sigma_d \xi - \lambda_2 \xi_2 \cdot \sigma_d \xi \quad (\text{C.28})$$

avec $\{\xi_1, \xi_2, \xi\}$ une base orthonormée dans \mathbb{R}^3 . La condition d'équilibre $\partial_{\sigma_d} G(\mathbf{a}_\perp, \lambda) = 0$ permet d'exprimer σ_d en fonction de λ_1 et λ_2 tel que

$$\sigma_d = \mathbb{L} \cdot \left(\xi \otimes_d \xi - \frac{1}{2} (\lambda_1 \xi_1 \otimes \xi + \lambda_2 \xi_2 \otimes \xi) \right). \quad (\text{C.29})$$

Le fait que $\xi_1 \cdot \sigma_d \xi = \xi_2 \cdot \sigma_d \xi = 0$ permet d'établir les deux équations

$$A_{11}\lambda_1 + A_{12}\lambda_2 = 2A_1 \quad (\text{C.30})$$

$$A_{12}\lambda_1 + A_{22}\lambda_2 = 2A_2 \quad (\text{C.31})$$

avec $A_{ij} = (\xi \otimes \xi_i) \cdot \mathbb{L}(\xi \otimes \xi_j)$ et $A_i = (\xi \otimes_d \xi) \cdot \mathbb{L}(\xi \otimes \xi_i)$. En injectant les λ_1 et λ_2 solutions de (C.30) et (C.31) dans (C.29) et en utilisant cette nouvelle expression de σ_d dans (C.27), il vient que

$$\alpha_{LAM}(1) = \frac{2}{15} \mathbb{K} \cdot \mathbb{L} - \left\langle \frac{A_{22}A_1^2 + A_{11}A_2^2 - 2A_{12}A_1A_2}{A_{11}A_{22} - A_{12}^2} \right\rangle. \quad (\text{C.32})$$

Annexe D

Méthodes numériques

1 Introduction

Cette annexe détaille les méthodes numériques utilisées dans ce travail de recherche, autant pour l'implémentation de lois de comportements dans le code de calcul FFT que pour l'évaluation des différents modèles d'homogénéisation construits à partir de méthodes variationnelles.

2 Méthodes d'intégration

Pour une loi puissance classique en viscoplasticité de type (2.8), l'équation différentielle

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbb{C} \cdot \mathbf{D} - \mathbb{C} \cdot \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}_0^{(k)} \left(\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \right)^n \text{sign}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}) \boldsymbol{\mu}^{(k)} \quad (\text{D.1})$$

peut être réécrite comme un système $\dot{\mathbf{Y}} = F(\mathbf{Y}, \mathbf{D})$, où le vecteur \mathbf{Y} est composé des six composantes indépendantes de $\boldsymbol{\sigma}$. Le système à intégrer en temps comporte six équations à six inconnues.

Pour la loi de Han (2012) présentée chapitre 8 section 2, le système d'équations différentielles à résoudre est plus complexe. Le système de 34 équations différentielles suivant l'évolution de 34 variables découle des expressions (8.4) à (8.9) et peut se réécrire

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = f_1(\mathbf{D}, \dot{\gamma}^{(k)}), \quad (\text{D.2})$$

$$\dot{\gamma} = f_2^{(k)}(\boldsymbol{\sigma}, \gamma^{(k)}, r_D^{(u)}, r_L^{(p)}), \quad (\text{D.3})$$

$$\dot{r}_D^{(k)} = f_3^{(k)}(\boldsymbol{\sigma}, \gamma^{(k)}, r_D^{(u)}, r_L^{(p)}), \quad (\text{D.4})$$

$$\dot{r}_L^{(p)} = f_4^{(p)}(\boldsymbol{\sigma}, \gamma^{(k)}, r_D^{(k)}, r_L^{(p)}) \quad (\text{D.5})$$

où $k = 1, \dots, 12$ et $p = 1, \dots, 4$. Le système peut aussi être mis sous la forme $\dot{\mathbf{Y}} = F(\mathbf{Y}, \mathbf{D})$ où le vecteur \mathbf{Y} contient les variables $\boldsymbol{\sigma}$, $\gamma^{(k)}$, $r_D^{(k)}$ et $r_L^{(p)}$.

Intégration explicite

Pour un incrément de temps ΔT donné, \mathbf{Y} est mis à jour par la méthode de Runge-Kutta (3)2 FSAL. Pour un incrément de temps donné, \mathbf{Y} est mis à jour par la méthode de Runge-Kutta d'ordre 3, puis par la méthode de Runge-Kutta d'ordre 2. Les deux estimations sont comparées, si elles sont suffisamment proches, l'estimation obtenue par la méthode Runge-Kutta d'ordre 3 est retenue, si elles sont trop éloignées, l'incrément de temps est diminué et le même protocole est réitéré. La propriété FSAL (First Same As Last) de la méthode Runge-Kutta

3(2) décomplexifie l'algorithme (en terme de nombre d'opérations à effectuer) car certains termes à évaluer sont équivalents d'une itération à l'autre. L'algorithme permettant de déterminer $\dot{\mathbf{Y}}$ prend en entrée $\dot{\mathbf{Y}}$ et \mathbf{Y} du pas précédent et la tolérance ε , fixée à 10^{-5} . Il est défini comme

Initialisation : $\mathbf{k}_{FSAL} = F(\mathbf{Y}_0)$, $\delta t = \Delta T$, $\Delta t = 0$, $n = 0$

tant que $\Delta t < \Delta T$ **faire**

1. Évaluation de \mathbf{Y}_{n+1} par la méthode de Runge-Kutta d'ordre 3

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_{FSAL}$$

$$\mathbf{k}_2 = F(\mathbf{Y}_n + a_{21}\mathbf{k}_1\delta t)$$

$$\mathbf{k}_3 = F(\mathbf{Y}_n + a_{31}\mathbf{k}_1\delta t + a_{32}\mathbf{k}_2\delta t)$$

$$\mathbf{Y}_{n+1} = \mathbf{Y}_n + (b_1\mathbf{k}_1 + b_2\mathbf{k}_2 + b_3\mathbf{k}_3)\delta t$$

2. Évaluation de $\hat{\mathbf{Y}}_{n+1}$ par la méthode de Runge-Kutta d'ordre 2

$$\mathbf{k}_{FSAL} = F(\mathbf{Y}_{n+1})$$

$$\hat{\mathbf{Y}}_{n+1} = \mathbf{Y}_n + (d_1\mathbf{k}_1 + d_2\mathbf{k}_2 + d_3\mathbf{k}_3 + d_4\mathbf{k}_{FSAL})\delta t$$

3. Évaluation de l'erreur relative η entre les deux méthodes

$$\eta = \max_i \left(|Y_{n+1}^{(i)} - \hat{Y}_{n+1}^{(i)}| / |Y_{n+1}^{(i)}| + 10^{-20} \right) \text{ où } Y^{(i)} \text{ est la } i\text{-ème composante de } \mathbf{Y}$$

4. Critère de convergence

si $\eta \leq \varepsilon$ **alors**

$$\mathbf{Y}_n := \mathbf{Y}_{n+1}$$

$$\Delta t := \Delta t + \delta t$$

$$n := n + 1$$

fin

5. Évaluation du pas de temps optimal δt

si $\eta \leq \varepsilon$ **alors**

$$\delta t_{opt} = \min \left(2, (\varepsilon/\eta)^{1/3} \right) \delta t$$

sinon

$$\delta t_{opt} = \max \left(1/2, 0.9 (\varepsilon/\eta)^{1/3} \right) \delta t$$

fin

$$\delta t = \min (\delta t_{opt}, \Delta T - \Delta t)$$

fin

où les coefficients a_{ij} , b_j et d_j sont définis comme $a_{21} = 1/2$, $a_{31} = 0$, $a_{32} = 3/4$, $b_1 = 2/9$, $b_2 = 1/3$, $b_3 = 4/9$, $d_1 = 7/24$, $d_2 = 1/3$ et $d_4 = 1/8$. La méthode de Runge-Kutta(3)2 FSAL a été implémentée dans le code de calcul CraFT pour intégrer aussi bien la loi de comportement cristalline classique de type loi puissance que la loi de Han.

Intégration implicite

Pour la loi de Han, le système à résoudre est fortement non linéaire et la méthode de Newton-Raphson semble être bien adaptée comme méthode d'intégration. Pour un incrément de chargement $\Delta\varepsilon$ et de temps ΔT donnés, le système à résoudre est mis sous la forme $R(\Delta\mathbf{Y}) = 0$, où $\Delta\mathbf{Y}$ contient les variables $\Delta\boldsymbol{\sigma}$, $\Delta\gamma^{(k)}$, $\Delta r_d^{(k)}$ et $\Delta r_L^{(p)}$ et où le résidu $R(\Delta\mathbf{Y})$ rassemble les fonctions R_1 , $R_2^{(k)}$, $R_3^{(k)}$ et $R_4^{(k)}$ (correspondant respectivement

aux résidus concernant $\Delta\sigma$, $\Delta\gamma^{(k)}$, $\Delta r_D^{(k)}$ et $\Delta r_L^{(p)}$ détaillées ici comme

$$R_1 = \Delta\sigma - \mathbb{C} \left(\Delta\varepsilon - \sum_{k=1}^{12} \Delta\gamma^{(k)} \boldsymbol{\mu}^{(k)} \right) \quad (\text{D.6})$$

$$R_2^{(k)} = \Delta\gamma^{(k)} - \phi \left(\left| (\Delta\sigma + \sigma) \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)} \right| - \tau_c^{(k)} \right) \text{sign} \left((\Delta\sigma + \sigma) \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)} \right) \Delta T \quad (\text{D.7})$$

$$R_3^{(k)} = \Delta r_D^{(k)} - \left| \Delta\gamma^{(k)} \right| \left(\frac{1}{\kappa} \left(\sqrt{\sum_{u=1}^{12} b^{(k,u)} (\Delta r_D^{(u)} + r_D^{(u)})} + \sqrt{K_{dl} \sum_{p=1}^4 (\Delta r_L^{(p)} + r_L^{(p)})} \right) - G_c (\Delta r_D^{(k)} + r_D^{(k)}) \right) \quad (\text{D.8})$$

$$R_4^{(p)} = \Delta r_L^{(p)} + A_L \left(\Delta r_L^{(p)} - r_L^{sat} + r_L^{(p)} \right) \sum_{k \in \text{plan}(p)} \left| \Delta\gamma^{(k)} \right| \sum_{k \in \text{plan}(p)} \left(\Delta r_D^{(k)} + r_D^{(k)} \right) \quad (\text{D.9})$$

où

$$\tau_c^{(k)} = \tau_0 + \tau_a e^{-|\Delta\gamma^{(k)} + \gamma^{(k)}|/\gamma_0} + \mu \left(\sqrt{\sum_{u=1}^{12} a^{(s,u)} (\Delta r_D^{(u)} + r_D^{(u)})} + \alpha_L \sqrt{\sum_{p=1}^4 (\Delta r_L^{(p)} + r_L^{(p)})} \right) \quad (\text{D.10})$$

Dans les équations (D.6) à (D.10), σ , $\gamma^{(k)}$, $r_D^{(k)}$ et $r_L^{(p)}$ sont connues, les inconnues sont $\Delta\sigma$, $\Delta\gamma^{(k)}$, $\Delta r_D^{(k)}$ et $\Delta r_L^{(p)}$. Dans l'équation (D.7), la fonction ϕ est de la forme $\phi(x) = \{x/K_0\}^n$. La matrice jacobienne \mathbf{J} est définie comme $\mathbf{J} = \partial_{\Delta\mathbf{Y}} R(\Delta\mathbf{Y})$. La méthode de Newton-Raphson est employée pour minimiser le résidu. L'algorithme de la méthode est implémenté dans le code de calcul CraFT comme suit. Par simplicité, la variable $\Delta\mathbf{Y}$ est notée \mathbf{X} . Le vecteur \mathbf{Y} contient les quantités connues (σ , $\gamma^{(k)}$, $r_D^{(k)}$ et $r_L^{(p)}$).

Données : \mathbf{Y} , \mathbf{X} , $\Delta\varepsilon$ et ΔT

Initialisation : $n = 0$, $\mathbf{X}_n = \mathbf{X}$, calcul du résidu $R(\mathbf{X}_n)$

tant que $n < 1000$ **faire**

1. Calcul de la matrice jacobienne J

2. Résolution par factorisation LU

$$J(\mathbf{X}_n) \delta \mathbf{X} = -R(\mathbf{X}_n)$$

3. Évaluation de la solution

$$\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{X}_n + \delta \mathbf{X}$$

$$\mathbf{Y}_{n+1} = \mathbf{Y}_n + \mathbf{X}_{n+1}$$

4. Vérification de la pertinence du résultat

si $r_D^{(k)} \in \mathbf{Y}_{n+1} < 0$ **alors**

$$r_D^{(k)} = 0$$

fin

si $r_L^{(p)} \in \mathbf{Y}_{n+1} < 0$ **alors**

$$r_L^{(p)} = 0$$

fin

5. Calcul du résidu

$$R(\mathbf{X}_{n+1})$$

6. Critère de convergence

si $|R^{(i)}(\mathbf{X}_{n+1})| - \text{tol} |\mathbf{Y}_{n+1}^{(i)}| < 0 \forall i$ **alors**

sortie

sinon

$$\mathbf{X}_n := \mathbf{X}_{n+1}$$

$$n := n + 1$$

fin

fin

La convergence de l'algorithme est gérée avec un critère arbitraire $|R^{(i)}(\mathbf{X}_{n+1})| - tol |\mathbf{Y}_{n+1}^{(i)}| < 0 \forall i$, avec $tol = 10^{-5}$. Avant le calcul du résidu, il faut s'assurer que les densités de dislocations et les densités de boucles de dislocations soient positives. Si ce n'est pas le cas, elles sont ramenées à zéro. Chaque terme de la matrice jacobienne est précisé ci-dessous.

$$\partial R_1 / \partial \Delta \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{I} \quad (\text{D.11})$$

$$\partial R_1 / \partial \Delta \gamma^{(m)} = \mathbb{C} \cdot \boldsymbol{\mu}^{(m)} \quad (\text{D.12})$$

$$\partial R_1 / \partial \Delta r_D^{(m)} = \mathbf{0} \quad (\text{D.13})$$

$$\partial R_1 / \partial \Delta r_L^{(q)} = \mathbf{0} \quad (\text{D.14})$$

$$\partial R_2^{(k)} / \partial \Delta \boldsymbol{\sigma} = -\phi' \left(|\tau^{(k)}| - \tau_c^{(k)} \right) \Delta T \boldsymbol{\mu}^{(k)} \quad (\text{D.15})$$

$$\partial R_2^{(k)} / \partial \Delta \gamma^{(m)} = \delta^{(k,m)} + \Delta T \phi' \left(|\tau^{(k)}| - \tau_c^{(k)} \right) \text{sign}(\tau^{(k)}) \cdot \partial \tau_c^{(k)} / \partial \Delta \gamma^{(m)} \quad (\text{D.16})$$

$$\partial R_2^{(k)} / \partial \Delta r_D^{(m)} = \Delta T \phi' \left(|\tau^{(k)}| - \tau_c^{(k)} \right) \text{sign}(\tau^{(k)}) \cdot \partial \tau_c^{(k)} / \partial \Delta r_D^{(m)} \quad (\text{D.17})$$

$$\partial R_2^{(k)} / \partial \Delta r_L^{(q)} = \Delta T \phi' \left(|\tau^{(k)}| - \tau_c^{(k)} \right) \text{sign}(\tau^{(k)}) \cdot \partial \tau_c^{(k)} / \partial \Delta r_L^{(q)} \quad (\text{D.18})$$

$$\partial R_3^{(k)} / \partial \Delta \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0} \quad (\text{D.19})$$

$$\partial R_3^{(k)} / \partial \Delta \gamma^{(m)} = -\delta^{(k,m)} \text{sign}(\Delta \gamma^{(k)}) \left(\sqrt{\sum_{u=1}^{12} b^{(k,u)} (\Delta r_D^{(u)} + r_D^{(u)})} + \sqrt{K_{dl} \sum_{p=1}^4 (\Delta r_L^{(p)} + r_L^{(p)}) - G_c (\Delta r_D^{(k)} + r_D^{(k)})} \right)$$

$$\partial R_3^{(k)} / \partial \Delta r_D^{(m)} = \delta^{(k,m)} - \left| \Delta \gamma^{(k)} \right| \left(\frac{1}{2\kappa} \sum_{u=1}^{12} b^{(m,u)} \left(\sum_{u=1}^{12} b^{(k,u)} (\Delta r_D^{(u)} + r_D^{(u)}) \right)^{-1/2} - G_c \delta^{(k,m)} \right) \quad (\text{D.20})$$

$$\partial R_3^{(k)} / \partial \Delta r_L^{(q)} = -\left| \Delta \gamma^{(k)} \right| \frac{K_{dl}}{2\kappa} \left(K_{dl} \sum_{p=1}^4 (\Delta r_L^{(p)} + r_L^{(p)}) \right)^{-1/2} \quad (\text{D.21})$$

$$\partial R_4^{(p)}/\partial \Delta \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0} \quad (\text{D.22})$$

$$\partial R_4^{(p)}/\partial \Delta \gamma^{(m)} = A_L \left(\Delta r_L^{(p)} + r_L^{(p)} - r_L^{sat} \right) \sum_{k \in \text{plan}(p)}^3 \left(\Delta r_D^{(k)} + r_D^{(k)} \right) \text{si } (m \in \text{plan}(p)) \text{sign}(\Delta \gamma^{(m)}) \quad (\text{D.23})$$

$$\partial R_4^{(p)}/\partial \Delta r_D^{(m)} = A_L \left(\Delta r_L^{(p)} + r_L^{(p)} - r_L^{sat} \right) \sum_{k \in \text{plan}(p)}^3 |\Delta \gamma^{(k)}| \text{si } (m \in \text{plan}(p)) \quad (\text{D.24})$$

$$\partial R_4^{(p)}/\partial \Delta r_L^{(q)} = \delta^{(p,q)} + \delta^{(p,q)} A_L \sum_{k \in \text{plan}(p)}^3 |\Delta \gamma^{(k)}| \sum_{k \in \text{plan}(p)}^3 \left(\Delta r_D^{(k)} + r_D^{(k)} \right) \quad (\text{D.25})$$

où

$$\partial \tau_c^{(k)}/\partial \Delta \gamma^{(m)} = -\frac{\tau_a}{\gamma_0} e^{-|\Delta \gamma^{(k)} + \gamma^{(k)}|/\gamma_0} \text{sign}(\Delta \gamma^{(k)} + \gamma^{(k)}) \quad (\text{D.26})$$

$$\partial \tau_c^{(k)}/\partial \Delta r_D^{(m)} = \mu a^{(k,m)} \left(4 \sum_{u=1}^{12} a^{(k,u)} \left(\Delta r_D^{(u)} + r_D^{(u)} \right) \right)^{-1/2} \quad (\text{D.27})$$

$$\partial \tau_c^{(k)}/\partial \Delta r_L^{(q)} = \alpha_L \left(4 \sum_{p=1}^4 \left(\Delta r_L^{(p)} + r_L^{(p)} \right) \right)^{-1/2} \quad (\text{D.28})$$

Le calcul de la matrice jacobienne étant complexe, les résultats ont été validés par comparaison avec le calcul numérique de J (dérivée approchée au premier ordre).

3 Intégration d'un modèle pour monocristaux poreux

On cherche à intégrer la surface de jauge de type (Leblond *et al.*, 1994) dans le code de calcul CraFT. Ici, conformément à la démarche de double changement d'échelle, les champs effectifs dans le monocristal poreux sont vus comme des champs locaux ($\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ correspond à $\boldsymbol{\sigma}$ et $\bar{\mathbf{D}}$ correspond à \mathbf{D}). Une surface de jauge $\mathcal{S}(\boldsymbol{\Sigma}) = 0$ de type (Leblond *et al.*, 1994) pour un monocristal poreux, présentée dans la chapitre 3 section 6, où le point hydrostatique correspond à l'estimation des laminés, est rappelée ici comme

$$\left(\sum_{k=1}^K \left| \boldsymbol{\Sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)} \right|^{n+1} \right)^{2/(n+1)} + f \left(h(\boldsymbol{\Sigma}_m) + \frac{n-1}{n+1} \frac{1}{h(\boldsymbol{\Sigma}_m)} \right) - 1 - \frac{n-1}{n+1} f^2 = 0 \quad (\text{D.29})$$

où

$$h(\boldsymbol{\Sigma}_m) = \left(1 + \frac{1}{\alpha_{LAM}(n)} \frac{\tau_0}{n} |\boldsymbol{\Sigma}_m|^{1+1/n} \right)^n. \quad (\text{D.30})$$

avec $\boldsymbol{\Sigma}$ le tenseur des contraintes normalisé par $\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{\sigma}/\lambda(\boldsymbol{\sigma})$. On cherche à relier les contraintes aux taux de déformations viscoplastique à partir de cette estimation. D'après les expressions (2.22) et (2.27), le tenseur des taux de déformations viscoplastiques dérive du potentiel effectif en contrainte et prend la forme

$$\mathbf{D}^{vp} = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\lambda(\boldsymbol{\sigma})}{\tau_0} \right|^n \partial_{\boldsymbol{\sigma}} \lambda(\boldsymbol{\sigma}) \text{sign}(\lambda(\boldsymbol{\sigma})). \quad (\text{D.31})$$

La définition de la surface de jauge $\mathcal{S}(\boldsymbol{\Sigma}) = 0$, où $\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{\sigma}/\lambda(\boldsymbol{\sigma})$, et le fait que $\partial_{\boldsymbol{\Sigma}} \mathcal{S} \partial_{\boldsymbol{\sigma}} \boldsymbol{\Sigma} = 0$ permettent de déduire par calcul direct une expression analytique pour $\partial_{\boldsymbol{\sigma}} \lambda(\boldsymbol{\sigma})$ telle que $\partial_{\boldsymbol{\sigma}} \lambda(\boldsymbol{\sigma}) = \lambda(\boldsymbol{\sigma}) \partial_{\boldsymbol{\Sigma}} \mathcal{S} / (\boldsymbol{\sigma} \cdot \partial_{\boldsymbol{\Sigma}} \mathcal{S})$.

Ainsi, la dernière expression prend la forme

$$\mathbf{D}^{vp} = \dot{\gamma}_0 \tau_0 \left| \frac{\lambda(\boldsymbol{\sigma})}{\tau_0} \right|^{n+1} \frac{1}{\boldsymbol{\sigma} \cdot \partial_{\boldsymbol{\Sigma}} \mathcal{S}(\boldsymbol{\Sigma})} \partial_{\boldsymbol{\Sigma}} \mathcal{S}(\boldsymbol{\Sigma}) \quad (\text{D.32})$$

où

$$\partial_{\boldsymbol{\Sigma}} \mathcal{S}(\boldsymbol{\Sigma}) = \frac{1}{3} \partial_{\boldsymbol{\Sigma}_m} \mathcal{S}(\boldsymbol{\Sigma}_m \mathbf{I}) \mathbf{I} + \partial_{\boldsymbol{\Sigma}_d} \mathcal{S}(\boldsymbol{\Sigma}_d) \quad (\text{D.33})$$

avec

$$\partial_{\boldsymbol{\Sigma}_m} \mathcal{S}(\boldsymbol{\Sigma}_m \mathbf{I}) = f \left(h'(\boldsymbol{\Sigma}_m) - \frac{n-1}{n+1} \frac{h'(\boldsymbol{\Sigma}_m)}{h^2(\boldsymbol{\Sigma}_m)} \right), \quad (\text{D.34})$$

$$\partial_{\boldsymbol{\Sigma}_d} \mathcal{S}(\boldsymbol{\Sigma}_d) = 2 \left(\sum_{k=1}^K |\boldsymbol{\Sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}|^{n+1} \right)^{(1-n)/(1+n)} \sum_{k=1}^K |\boldsymbol{\Sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}|^n \boldsymbol{\mu}^{(k)} \text{sign}(\boldsymbol{\Sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}) \quad (\text{D.35})$$

où

$$h'(\boldsymbol{\Sigma}_m) = \tau_0 \frac{1}{\alpha_{LAM}(n)} \left(1 + \frac{1}{n} \right) \left(1 + \frac{1}{\alpha_{LAM}(n)} \frac{\tau_0}{n} |\boldsymbol{\Sigma}_m|^{1+1/n} \right)^{n-1} |\boldsymbol{\Sigma}_m|^{1/n} \text{sign}(\boldsymbol{\Sigma}_m). \quad (\text{D.36})$$

Dans l'expression (D.32), λ peut être évalué à partir de l'expression de la surface de jauge écrite ici comme

$$\frac{1}{\lambda^2} \left(\sum_{k=1}^K |\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}|^{n+1} \right)^{2/(n+1)} + f \left(h(\lambda) + \frac{n-1}{n+1} \frac{1}{h(\lambda)} \right) - 1 - \frac{n-1}{n+1} f^2 = 0 \quad (\text{D.37})$$

avec

$$h(\lambda) = \left(1 + \frac{1}{\alpha_{LAM}(n)} \frac{\tau_0}{n} \left| \frac{\boldsymbol{\sigma}_m}{\lambda} \right|^{1+1/n} \right)^n. \quad (\text{D.38})$$

Les équations (D.32) et (D.37) permettent de relier les contraintes aux taux de déformations viscoplastiques. Afin de régulariser ce système d'équations, les taux de contraintes sont reliés aux taux de déformations viscoplastiques par

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbb{C} \cdot (\mathbf{D} - \mathbf{D}^{vp}) \quad (\text{D.39})$$

où \mathbb{C} peut être choisit arbitrairement puisque dans ce travail l'étude du régime élasto-viscopastique n'est pas considérée. Les champs mécaniques d'intérêt sont considérés lorsque l'état des contraintes est suffisamment important pour que les déformations d'origine élastique soient négligeables devant les déformations d'origine viscoplastique. L'équation (D.39) est intégrée en temps par la méthode de Runge-Kutta 3(2) FSAL décrite dans la section précédente. Au cours de l'algorithme, lorsqu'il est nécessaire d'évaluer les taux de déformation viscoplastiques \mathbf{D}^{vp} , la variable λ est obtenue grâce à l'expression (D.37) via la méthode de Newton. Pour $\lambda = 0$, la fonction (D.37) tend vers l'infini. De ce fait, un soin particulier doit être accordé à l'initialisation de l'algorithme de Newton. La surface de jauge (D.37) peut se réécrire comme

$$\frac{1}{\lambda^2} \left(\sum_{k=1}^K |\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}|^{n+1} \right)^{2/(n+1)} + f \sqrt{\frac{n-1}{n+1}} \left(\sqrt{\frac{n+1}{n-1}} h(\lambda) + \sqrt{\frac{n-1}{n+1}} \frac{1}{h(\lambda)} \right) - 1 - \frac{n-1}{n+1} f^2 = 0. \quad (\text{D.40})$$

Le simple fait que $x + 1/x \geq 2$ lorsque $x \geq 0$, avec ici $x = \sqrt{(n+1)/(n-1)} h(\lambda)$, permet d'établir l'inégalité

$$\lambda \geq \left(\sum_{k=1}^K |\boldsymbol{\sigma}_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}|^{n+1} \right)^{1/(n+1)} \left| \sqrt{\frac{n-1}{n+1}} f - 1 \right|^{-1}. \quad (\text{D.41})$$

La dernière expression est choisie pour initialiser λ dans l'algorithme de Newton. De même, un traitement particulier peut être accordé au cas d'un chargement purement hydrostatique, où λ peut être obtenu par calcul direct via l'expression (D.40) qui prend la forme

$$\lambda = \left(\alpha_{LAM}(n) \frac{n}{\tau_0} \left(f^{-1/n} - 1 \right) \right)^{-n/(n+1)} |\sigma_m|. \quad (\text{D.42})$$

De manière analogue, dans le cas particulier d'un chargement purement déviatorique, λ peut être obtenu par calcul direct via l'expression (D.40) qui prend la forme

$$\lambda = \left(\sum_{k=1}^K |\sigma_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}|^{n+1} \right)^{1/(n+1)} \left(1 + \frac{n-1}{n+1} f^2 \right)^{-1/2}. \quad (\text{D.43})$$

L'algorithme de Newton pour l'évaluation de λ , tel qu'implémenté dans CraFT, est détaillé ci-dessous :

Initialisation : calcul de σ_m , σ_d et σ_{eq} via \mathbf{Y} , calcul de $X_\sigma = \sigma_m/\sigma_{eq}$, calcul de λ_0 via (D.41)

si $X_\sigma > 10^5$ **alors**

1. Évaluation de λ pour un chargement purement hydrostatique

λ évalué via (D.42)

sortie

fin

si $X_\sigma < 10^{-5}$ **alors**

2. Évaluation de λ pour un chargement purement déviatorique

λ évalué via (D.43)

sortie

fin

tant que $n < 1000$ **faire**

3. Affectation

$\lambda_n := \lambda_{n+1}$

4. Évaluation de la solution via (D.37) et (D.38)

$\lambda_{n+1} = \lambda_n - \mathcal{S}(\lambda_n)/\partial_{\lambda_n} \mathcal{S}(\lambda_n)$

5. Critère de convergence

si $|\lambda_{n+1} - \lambda_n| - \varepsilon < 0$ **alors**

sortie

sinon

$n := n + 1$

fin

fin

Dans l'étape 4 de l'algorithme, la dérivée $\partial_\lambda \mathcal{S}(\lambda)$ correspond à l'expression

$$\partial_\lambda \mathcal{S}(\lambda) = -\frac{2}{\lambda^3} \left(\sum_{k=1}^K |\sigma_d \cdot \boldsymbol{\mu}^{(k)}|^{n+1} \right)^{2/(n+1)} + f \left(h'(\lambda) - \frac{n-1}{n+1} \frac{h'(\lambda)}{h^2(\lambda)} \right) - 1 - \frac{n-1}{n+1} f^2 \quad (\text{D.44})$$

où

$$h'(\lambda) = -\frac{1}{\lambda} \frac{n+1}{n} \frac{\tau_0}{\alpha_{LAM}} \left(1 + \frac{1}{\alpha_{LAM}(n)} \frac{\tau_0}{n} \left| \frac{\sigma_m}{\lambda} \right|^{1+1/n} \right)^{n-1} \left| \frac{\sigma_m}{\lambda} \right|^{1+1/n}. \quad (\text{D.45})$$

Dans le but de valider l'implémentation dans CraFT, les simulations FFT réalisées sur une cellule unitaire homogène de 2^3 pixels, où localement le comportement dérive de l'estimation LPS, sont comparées à l'expression analytique de la surface de jauge de type LPS dans la figure D.1 pour des chargements axisymétriques de type $\Lambda_1 < \Lambda_2$ sur des cristaux cubiques à faces centrées faiblement anisotropes ayant des porosités $f = 0.01$ ou $f = 0.1$ et des exposants de viscosité $n = 1$ et $n = 15$. Les courbes présentent la surface de jauge dans le plan $\Sigma_m - \Sigma_{eq}$. On constate un bon accord entre l'expression analytique et les simulations numériques.

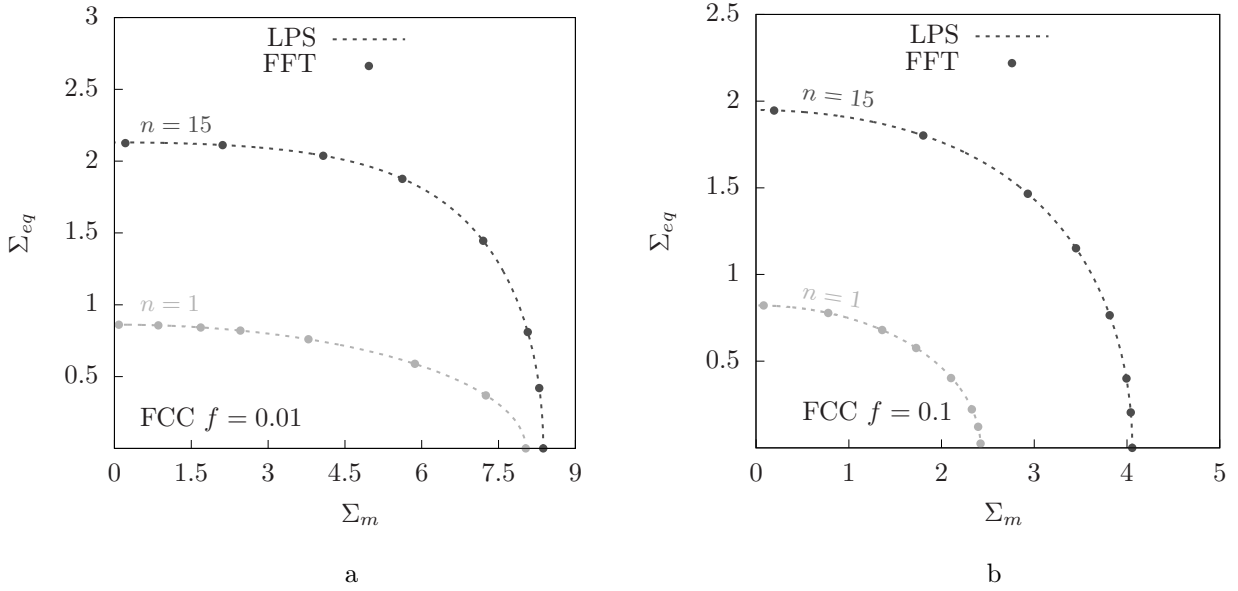


FIGURE D.1 – Surfaces de jauge dans le plan $\Sigma_m - \Sigma_{eq}$ pour des cristaux cubiques à faces centrées faiblement anisotropes ($\tau_0^{(k)} = \tau_0 \forall k$) d'exposant de viscosité $n = 1$ ou $n = 15$ sujets à un chargement axisymétrique de type $\lambda_1 < \lambda_2$. a : Pour une porosité $f = 0.01$. b : Pour une porosité $f = 0.1$. Les simulations FFT ont été obtenues avec l'estimation LPS sur une cellule unitaire homogène de 2^3 pixels.

4 Méthodes d'optimisation

Évaluation numérique des facteurs α_{HSA} et α_{LAM}

Pour calculer numériquement le coefficient α_{HSA} défini par (3.28), on évalue l'intégration sur la sphère unitaire par quadrature de Gauss avec 30 points d'intégration par variable. Pour évaluer le supremum sur $\sigma_d \in \mathcal{T}_d$ en chaque ξ de la sphère unitaire, on exprime les éléments de l'ensemble \mathcal{T}_d comme

$$\sigma_d = \sum_{\alpha=1}^5 \sigma_\alpha \eta_\alpha, \quad (D.46)$$

où η_α constitue la base de Woo de la forme

$$\eta_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}(2\xi \otimes \xi - \xi_1 \otimes \xi_1 - \xi_2 \otimes \xi_2), \quad (D.47)$$

$$\eta_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi_1 \otimes \xi_1 - \xi_2 \otimes \xi_2), \quad (D.48)$$

$$\eta_3 = \sqrt{2}\xi_1 \otimes_s \xi_2, \quad (D.49)$$

$$\eta_4 = \sqrt{2}\xi_1 \otimes_s \xi, \quad (D.50)$$

$$\eta_5 = \sqrt{2}\xi_2 \otimes_s \xi. \quad (D.51)$$

Ici, $\{\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, \boldsymbol{\xi}\}$ est une base orthonormée de \mathbb{R}^3 avec $\boldsymbol{\xi}$ la direction du point considéré sur la sphère unitaire. La fonction objective est alors maximisée par rapport aux composantes σ_α par la méthode de Powell disponible dans la librairie « optimize » (projet SciPy) en Python. Lorsque $n \rightarrow \infty$, la minimisation sous contrainte est évaluée par la méthode COBYLA (pour Constrained Optimization By Linear Approximation), aussi implémentée dans la librairie « optimize ». Le coefficient α_{LAM} défini par (4.31) est évalué de manière similaire. A la différence que, étant donné l'ensemble $\mathcal{T}_{||}(\boldsymbol{\xi})$ des $\boldsymbol{\sigma}_d$ admissibles, $\boldsymbol{\sigma}_d$ est décomposé comme (D.46) et $\sigma_4 = \sigma_5 = 0$. Ainsi, la fonction α_{LAM} est numériquement plus simple à évaluer que la fonction α_{HSA} .

Évaluation numérique des estimations *HSA*, *HSA+* et *LAM*

Les intégrales des expressions (3.11), (3.20) et (4.20) correspondant respectivement aux modèles *HSA*, *HSA+* et *LAM*, sont évaluées par quadrature de Gauss avec 30 points d'intégration par variable. Pour évaluer les supremums, on utilise la méthode de Powell implémentée directement en C++. On n'utilise pas de bibliothèques par soucis de portabilité. De manière générale, on préfère évaluer les estimations en C++ plutôt qu'en Python car l'évaluation d'une triple intégrale où en chaque point d'intégration un supremum doit être évalué nécessite plus de performance que l'évaluation des facteurs α_{HSA} et α_{LAM} . On préfère donc utiliser un langage à compiler comme le C++ pour gagner en rapidité.

Annexe E

Aciers inoxydables austénitiques irradiés

1 Introduction

Cette annexe précise les valeurs des différents paramètres du modèle de Han (2012) pour un acier inoxydable austénitique de type SA304L irradié à 13 dpa à la température de 330 ° C (température d'irradiation et d'essai).

2 Propriétés locales

Dans le modèle de Han (2012), les interactions entre les lignes de dislocations, à l'origine du durcissement des aciers, sont modélisées par une matrice d'interaction \mathbf{a} de la forme

k	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	a_1	a_2	a_2	a_4	a_5	a_5	a_5	a_6	a_3	a_5	a_3	a_6
2	a_2	a_1	a_2	a_5	a_3	a_6	a_4	a_5	a_5	a_5	a_6	a_3
3	a_2	a_2	a_1	a_5	a_6	a_3	a_5	a_3	a_6	a_4	a_5	a_5
4	a_1	a_5	a_5	a_1	a_2	a_2	a_6	a_5	a_3	a_6	a_3	a_5
5	a_5	a_3	a_6	a_2	a_1	a_2	a_3	a_5	a_6	a_5	a_5	a_4
6	a_5	a_6	a_3	a_2	a_2	a_1	a_5	a_4	a_5	a_3	a_6	a_5
7	a_5	a_4	a_5	a_6	a_3	a_5	a_1	a_2	a_2	a_6	a_5	a_3
8	a_6	a_5	a_3	a_5	a_5	a_4	a_2	a_1	a_2	a_3	a_3	a_6
9	a_3	a_5	a_6	a_3	a_6	a_5	a_3	a_2	a_1	a_5	a_4	a_5
10	a_5	a_5	a_4	a_6	a_5	a_3	a_6	a_3	a_5	a_1	a_2	a_3
11	a_3	a_6	a_5	a_3	a_5	a_6	a_5	a_5	a_4	a_2	a_1	a_2
12	a_6	a_3	a_5	a_5	a_4	a_5	a_3	a_6	a_5	a_2	a_2	a_1

TABLE E.1 – Matrice d'interaction entre dislocations

Han a aussi déterminé par l'intermédiaire d'une étude bibliographique les valeurs des variables à l'état initial. Les variables $r_D^{(s)}$ et $r_L^{(p)}$ sont des variables adimensionnées pour éviter un mauvais conditionnement lors de résolutions numériques. Les valeurs des différents paramètres de la loi ont été identifiées par Han (2012) soit par recherche bibliographique, soit par étude de sensibilité, soit par recoupement de résultats de simulations, soit par comparaison entre simulations et études expérimentales. Han a déterminé tous les paramètres pour un acier SA304L irradié à 13 dpa pour une température de 330 ° C. Les différents paramètres sont listés ci-dessous.

Paramètres d'élasticité (notation de Kelvin)

C_{11}	198.6 GPa
C_{12}	136.2 GPa
C_{44}	209.4 GPa

Paramètres de viscosité

n	15
K_0	$10^{-3} \text{ MPa/s}^{-1/n}$

Paramètres d'écrouissage

τ_0	88 MPa
τ_a	$61.2 \cdot 10^{-3} \text{ MPa}$
γ_0	0.05
μ	65.5 GPa
a_1	0.124
a_2	0.124
a_3	0.07
a_4	0.625
a_5	0.137
a_6	0.122
α_L	0.57

Paramètres d'évolution des dislocations

κ	40
$b^{(i,i)}$	0
$b^{(i,j)}$	1 si $i \neq j$
K_{dl}	$0.25 \cdot 10^{-6}$
G_c	10.4

Paramètres d'évolution des boucles de dislocation

A_L	$55.48 \cdot 10^7$
r_L^{sat}	$3.234 \cdot 10^{-6}$

Variables à l'état initial

$\dot{\gamma}^{(k)}$	$0 \forall k$
$r_D^{(k)}$	$1.03 \cdot 10^{-11} \forall k$
$r_L^{(p)}$	$4.9 \cdot 10^{-6} \forall p$

Bibliographie

- M. AGORAS et P. PONTE CASTAÑEDA : Iterated linear comparison bounds for viscoplastic porous materials with “ellipsoidal” microstructures. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 61:701–725, 2013.
- A. BARBU et J.-P. MASSOUD : Comportement des matériaux dans le coeur des REP. *Techniques de l'ingénieur*, BN3 760, 2008.
- A. BENZERGA et J.-B. LEBLOND : Ductile fracture by void growth to coalescence. *Advances in Applied Mechanics*, 44:169–305, 2010.
- P. BOIRON et B. MONNIER : Construction des centrales REP, Équipements primaires. *Techniques de l'ingénieur*, B3 270, 1995.
- G. M. BOND, B. H. SENCER, F. A. GARNER, M. L. HAMILTON, T. R. ALLEN et D. L. PORTER : Comportement des matériaux dans le coeur des REP. *In Proceedings of 9th International Conference on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems - Water Reactors*, pages 1045–1050, 1999.
- G. BOUCHITTE et P. SUQUET : Homogenization, plasticity and yield design. *In Maso, G. D. & Dell'Antonio, G. (eds), Composite Media and Homogenization Theory*, pages 107–133, 1991.
- H. R. BRAGER, F. A. GARNER, D. S. GELLES et M. L. HAMILTON : Development of reduced activation alloys for fusion service. *Journal of Nuclear Materials*, 133–134:907–911, 1985.
- S. M. BRUEMMER, E. P. SIMONEN, P. M. SCOTT, P. L. ANDRESEN, G. S. WAS et J. L. NELSON : Radiation-induced material changes and susceptibility to intergranular failure of light-water-reactor core internals. *Journal of Nuclear Materials*, 274:299–314, 1999.
- G. CAILLETAUD : A micromechanical approach to inelastic behaviour of metals. *International Journal of Plasticity*, 8:55–73, 1992.
- Y. CHEN, A.S. RAO, B. ALEXANDREANU et K. NATESAN : Slow strain rate tensile tests on irradiated austenitic stainless steels in simulated light water reactor environments. *Nuclear Engineering and Design*, 269:38–44, 2014.
- J. CRÉPIN, T. BRETHERAU et D. CALDEMAISON : Cavity growth and rupture of β -treated zirconium : a crystallographic model. *Acta Materialia*, 44:4927–4935, 1996.
- K. DANAS, M. I. IDIART et P. PONTE CASTAÑEDA : A homogenization-based constitutive model for isotropic viscoplastic porous media. *International Journal of Solids and Structures*, 45(11–12):3392–3409, 2008.

- G. DEBOTTON : Transversely isotropic sequentially laminated composites in finite elasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 53:1334–1361, 2005.
- G. DEBOTTON et P. PONTE CASTAÑEDA : Variational estimates for the creep behaviour of polycrystals. *Proceedings of the Royal Society of London Series A Mathematical and Physical Sciences journal*, 448:121–142, 1995.
- D. J. EDWARDS, F. A. GARNER, S. M. BRUEMMER et P. G. EFSING : Nano-cavities observed in a 316SS PWR flux thimble tube irradiated to 33 and 70 dpa. *Journal of Nuclear Materials*, 384:249–255, 2009.
- D. J. EDWARDS, E. P. SIMONEN, F. A. GARNER, L. R. GREENWOOD, B.A. OLIVER et S. M BRUEMMER : Influence of irradiation temperature and dose gradients on the microstructural evolution in neutron-irradiated 316SS. *Journal of Nuclear Materials*, 317:32–45, 2003.
- P. FRANCIOSI : The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals. *Acta Metallurgica*, 33:1601–1612, 1985.
- M. GARAJEU, J.-C. MICHEL et P. SUQUET : A micromechanical approach of damage in viscoplastic materials by evolution in size, shape and distribution of voids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 183:223–246, 2000.
- F. A. GARNER : Radiation damage in austenitic steels. *Comprehensive Nuclear Materials*, 4:33–95, 2012.
- F. A. GARNER, D. J. EDWARDS, S. M. BRUEMMER, S. I. POROLLO, Y. V. KONOBEV, V. S. NEUSTROEV, V. K. SHAMARDIN, A. V. KOZLOV, I. I. BALACHOV et Y. ISOBE : Recent developments concerning void swelling in pwr internals at relatively low irradiation temperatures. *Effect of Radiation on materials, 21st International Symposium ASTM*, 2004.
- F. A. GARNER, S. I. POROLLO, Y. V. KONOBEV, V. S. NEUSTROEV, V. YU, V. S. NEUSTROEV et O. P. MAKSIMKIN : *In Proceedings of Fontevraud-6 Symposium on Contribution of Materials Investigations to Improve the Safety and Performance of LWRs*, 2006.
- J.-M. GATT, Y. MONERIE, D. LAUX et D. BARON : Elastic behavior of porous ceramics : application to nuclear fuel materials. *Journal of Nuclear Materials*, 336:145–155, 2005.
- F. GRENNERAT, M. MONTAGNAT, O. CASTELNAU, P. VACHER, H. MOULINEC, P. SUQUET et P. DUVAL : Experimental characterization of the intragranular strain field in columnar ice during transient creep. *Acta Materialia*, 60(8):3655–3666, 2012.
- A. L. GURSON : Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth : Part i - yield criteria. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 99:2–15, 1977.
- X. HAN : *Modélisation de la fragilisation due au gonflement dans les aciers inoxydables austénitiques irradiés*. Thèse de doctorat, École nationale supérieure des mines de Paris, 2012.
- X. HAN, J. BESSON, S. FOREST, B. TANGUY et S. BUGAT : A yield function for single crystals containing voids. *International Journal of Solids and Structures*, 50:2115–2131, 2013.
- Z. HASHIN : The elastic moduli of heterogeneous materials. *Journal of Applied Mechanics*, 29:143–150, 1962.

- E HERVÉ, C. STOLTZ et A. ZAOUÏ : A propos de l'assemblage de sphères composites de Hashin. *Compte-Rendu de l'Académie des Sciences Paris II*, 313:857–862, 1991.
- J.-P. HUTIN : Gestion de la durée de vie des centrales nucléaires. *Techniques de l'ingénieur*, BN 3:307, 2006.
- M. I. IDIART : Nonlinear sequential laminates reproducing hollow sphere assemblages. *Comptes Rendus Mécanique*, 2007:363–368, 2007.
- M. I. IDIART : Modeling the macroscopic behavior of two-phase nonlinear composites by infinite-rank laminates. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 56:2599–2617, 2008.
- M. I. IDIART : Bounding the plastic strength of polycrystalline solids by linear-comparison homogenization methods. *Proceedings of the Royal Society A*, 468:1136–1153, 2012.
- M. I. IDIART, H. MOULINEC, P. PONTE CASTAÑEDA et P. SUQUET : Macroscopic behavior and field fluctuations in viscoplastic composites : second-order estimates vs full-field simulations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 54:1029–1063, 2006.
- M. I. IDIART, F. WILLOT, Y.-P. PELLEGRINI et P. PONTE CASTANEDA : Infinite-contrast periodic composites with strongly nonlinear behavior : effective-medium theory versus full-field simulations. *International Journal of Solids and Structures*, 46:3365–3382, 2009.
- A. JELEA : La modélisation par dynamique d'amas des évolutions sous irradiation dans les aciers inoxydables austénitiques. *Rapport IRSN PSN-RES/SEMIA-2015-00305*, 2015.
- L. JÖESSEL, P.-G. VINCENT, M. GARAJEU et M. I. IDIART : Viscoplasticity of voided cubic crystals under hydrostatic loading. *International Journal of Solids and Structures*, 147:156–165, 2018.
- S. KRISHNA et S. DE : Dislocation and defect density-based micromechanical modeling of the mechanical behavior of fcc metals under neutron irradiation. *Mechanics of Materials*, 43:99–110, 2011.
- S. KRISHNA, A. ZAMIRI et S. DE : A temperature and rate-dependent micromechanical model of molybdenum under neutron irradiation. *Philosophical Magazine*, 90:4013–4025, 2010.
- R. A. LEBENSOHN, M. I. IDIART, P. PONTE CASTAÑEDA et P.-G. VINCENT : Dilatational viscoplasticity of polycrystalline solids with intergranular cavities. *Philosophical Magazine*, 91:3038–3067, 2011.
- J.-B. LEBLOND, G. PERRIN et P. SUQUET : Exact results and approximate models for porous viscoplastic solids. *International Journal of Plasticity*, 10:213–235, 1994.
- N. LIGNEAU et E. LEMAIRE : Dossier d'aptitude à la poursuite de l'exploitation pendant 40 ans des internes de cuve des REP 900 MWe. *Note EDF, Réf. ENRECP040115 A*, 18/01/2005, 2005.
- Y. LIU, P. GILORMINI et P. PONTE CASTAÑEDA : Variational self-consistent estimates for texture evolution in viscoplastic polycrystals. *Acta Materialia*, 51:5425–5437, 2003.
- Y. LIU et P. PONTE CASTAÑEDA : Homogenization estimates for the average behavior and field fluctuations in cubic and hexagonal viscoplastic polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52:1175–1211, 2004.

- A. MBIAKOP : *Homogénéisation non linéaire des matériaux poreux monocristallins : Modélisation, implémentation numérique et applications au fluage et à la fatigue*. Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique, 2015.
- A. MBIAKOP, A. CONSTANTINESCU et K. DANAS : An analytical model for porous single crystals with ellipsoidal voids. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 84:436–467, 2015.
- J. C. MICHEL et P. SUQUET : The constitutive law of nonlinear viscous and porous materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 40:783–812, 1992.
- H.-L. MING, Z.-M. ZHANG, P.-Y. XIU, J.-Q. WANG, E.-H. HAN, W. KE et M.-X. SU : Microstructure, residual strain and stress corrosion cracking behavior in 316L heat-affected zone. *Acta Metallurgica Sinica*, 29:848–858, 2016.
- H. MOULINEC et P. SUQUET : A fast numerical method for computing the linear and nonlinear properties of composites. *Compte-Rendu de l'Académie des Sciences Paris II*, 318:1417–1423, 1994.
- H. MOULINEC et P. SUQUET : A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 157:69–94, 1998.
- M. V. NEBOZHYN, P. GILORMINI et P. PONTE CASTAÑEDA : Variational self-consistent estimates for viscoplastic polycrystals with highly anisotropic grains. *Compte-Rendu de l'Académie des Sciences Paris II*, 328:11–17, 2000.
- M.V. NEBOZHYN, P. GILORMINI et P. PONTE CASTAÑEDA : Variational self-consistent estimates for cubic viscoplastic polycrystals : the effects of grain anisotropy and shape. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49:313–340, 2001.
- V. S. NEUSTROEV et F. A. GARNER : Very high swelling and embrittlement observed in a Fe-18C-10Ni-Ti hexagonal fuel wrapper irradiated in the BOR-60 fast reactor. *Journal of Nuclear Materials*, 378:327–332, 2008.
- J. PAUX : *Contribution à la modélisation micromécanique de la plasticité de matériaux cristallins poreux*. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, 2017.
- J. PAUX, R. BRENNER et D. KONDO : Plastic yield criterion and hardening of porous single crystals. *International Journal of Solids and Structures*, 132–133:80–95, 2018.
- J. PAUX, L. MORIN, R. BRENNER et D. KONDO : An approximate yield criterion for porous single crystals. *European Journal of Mechanics A/Solids*, 51:1–10, 2015.
- C. POKOR : *Caractérisation microstructurale et modélisation du durcissement des aciers austénitiques irradiés des structures internes des réacteurs à eau pressurisée*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2002.
- C. POKOR, X. AVERTY, Y. BRECHET, P. DUBUISSON et J.-P. MASSOUD : Effect of irradiation defects on the work hardening behavior. *Scripta Materialia*, 50:597–600, 2004a.
- C. POKOR, Y. BRECHET, P. DUBUISSON, J.-P. MASSOUD et X. AVERTY : Irradiation damage in 304 and 316 stainless steels : experimental investigation and modeling part i : Evolution of the microstructure. *Journal of Nuclear Materials*, 326:19–29, 2004b.

- C. POKOR, Y. BRECHET, P. DUBUISSON, J.-P. MASSOUD et X. AVERTY : Irradiation damage in 304 and 316 stainless steels : experimental investigation and modeling part ii : Irradiation induced hardening. *Journal of Nuclear Materials*, 326:30–37, 2004c.
- P. PONTE CASTAÑEDA : Fully optimized second-order variational estimates for the macroscopic response and field statistics in viscoplastic crystalline composites. *Proceedings of the Royal Society A*, 471:20150665, 2015.
- P. PONTE CASTAÑEDA et P. SUQUET : Nonlinear composites. *Advances in Applied Mechanics*, 34:171–302, 1998.
- P. PONTE CASTAÑEDA : The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 39:45–71, 1991.
- J. E. RAMOS NERVI et M. I. IDIART : Bounding the plastic strength of polycrystalline voided solids by linear-comparison homogenization techniques. *Proceedings of the Royal Society A*, 471, 2015.
- A. RENAULT, J. MALAPATE, C. POKOR et P. GAVOILLE : TEM and EFTEM characterization of solution annealed 304L stainless steel irradiated in PHENIX, up to 36 dpa and at 390 °C. *Journal of Nuclear Materials*, 421:124–131, 2012.
- D. SONG et P. PONTE CASTAÑEDA : A finite-strain homogenization model for viscoplastic porous single crystals : I – theory. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 107:560–579, 2017a.
- D. SONG et P. PONTE CASTAÑEDA : A finite-strain homogenization model for viscoplastic porous single crystals : II – applications. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 107:580–602, 2017b.
- D. SONG et P. PONTE CASTAÑEDA : A multi-scale homogenization model for fine-grained porous viscoplastic polycrystals : I – finite-strain theory. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 115:102–122, 2018a.
- D. SONG et P. PONTE CASTAÑEDA : A multi-scale homogenization model for fine-grained porous viscoplastic polycrystals : II – applications to fcc and hcp materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 115:77–101, 2018b.
- A. SRIVASTAVA et A. NEEDLEMAN : Void growth versus void collapse in a creeping single crystal. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 61:1169–1184, 2013.
- P. SUQUET : Overall properties of nonlinear composites : a modified secant moduli approach and its link with Ponte Castañeda’s nonlinear variational procedure. *Compte-Rendu de l’Académie des Sciences Paris II*, 320:563–571, 1995.
- P. SUQUET, H. MOULINEC, O. CASTELNAU, M. MONTAGNAT, N. LAHELLEC, F. GRENNERAT, R. DUVAL et R. BRENNERE : Multi-scale modeling of the mechanical behavior of polycrystalline ice under transient creep. *Procedia IUTAM*, 3:76–90, 2012.
- V. TVERGAARD : On localization in ductile materials containing spherical voids. *International Journal of Fracture*, 18:237–252, 1982.
- P.-G. VINCENT : *Modélisation micromécanique de la croissance et de la percolation de pores sous pression dans une matrice céramique à haute température*. Thèse de doctorat, Université de Provence - Aix-Marseille I, 2007.

- P.-G. VINCENT : Vieillissement des internes de cuve, éléments bibliographiques. *Rapport IRSN PSN-RES/SEMIA-2012-00231*, 2012.
- P.-G. VINCENT : Di5.9 – internals : Full-field simulations for a porous FCC aggregate using a FFT-based method – Results for an irradiated stainless steel. *Rapport IRSN PSN-RES/SEMIA-2017-00428*, 2018.
- P.-G. VINCENT, P. SUQUET, MONERIE, Y. et H. MOULINEC : Effective flow surface of porous materials with two populations of voids under internal pressure : II. full-field simulations. *International Journal of Plasticity*, 56:74–98, 2014.
- J. R. WILLIS : The structure of overall constitutive relations for a class of nonlinear composites. *IMA Journal of Applied Mathematics*, 43:231–242, 1989.
- S. K. YERRA, C. TEKOGU, L. SCHEYVAERTS, L. DELANNAY, P. VAN HOUTTE et T. PARDOEN : Void growth and coalescence in single crystals. *International Journal of Solids and Structures*, 47:1016–1029, 2010.
- M. L. ZOUARI : *Modélisation par dynamique d'amas des évolutions microstructurales et du gonflement sous irradiation dans les aciers inoxydables austénitiques*. Thèse de doctorat, Service Métallurgie et Corrosion d'AREVA NP, 2012.