COLLEGES SCIENCES
BRETAGNE POUR L'INGENIEUR
LOIRE ET LE NUMERIQUE

ENSTA
IP PARIS

THESE DE DOCTORAT DE

L'ECOLE NATIONALE SUPERIEURE
DE TECHNIQUES AVANCEES

ECOLE DOCTORALE N° 648
Sciences pour l'Ingénieur et le Numérique
Spécialité : *Mécaniques des Solides, des Matériaux, des Structures et des Surface*

Par

André CALAZANS MENESCAL DE SOUZA

Apports des simulations par la méthode FFT sur des agrégats polycristallins à l'étude de la dissipation des métaux sous sollicitations cycliques de faible amplitude

Thèse présentée et soutenue à Brest, le jeudi 12 février 2026
Unité de recherche : Institut de Recherche Dupuy de Lôme UMR CNRS 6027

Rapporteurs avant soutenance :

Fabrice BARBE	Professeur des Universités, INSA Rouen, GPM
Lionel GÉLÉBART	Ingénieur de recherche HDR, CEA Paris-Saclay

Composition du Jury :

Président :	Prénom Nom	Fonction et établissement d'exercice (9)
Examinateurs :	André CHRYSOCHOOS	Professeur des Universités émérite, Université de Montpellier, LMGCL
	Florent BRIDIER	Ingénieur de recherche et développement, Naval Group
	Lionel MARCIN	Ingénieur de recherche HDR, Safran Aircraft Engine
	Pascale KANOUTÉ	Ingénieur de recherche, ONERA, Paris
	Philippe PILVIN	Professeur des Universités émérite, UBS Lorient, IRDL
Dir. de thèse :	Sylvain CALLOCH	Professeur des Universités, ENSTA IPP Brest, IRDL
Encadrants :	Cédric DOUDARD	Professeur, ENSTA IPP Brest, IRDL
	Sylvain MOYNE	Enseignant-chercheur, ENSTA IPP Brest, IRDL
	Luc SAINT-SULPICE	Maitre de conférences, INP-ENIB, IRDL

Remerciements

Cette thèse s'est déroulée à l'Institut de Recherche Dupuy de Lôme, sur le site de l'ENSTA, dans le cadre de la chaire industrielle « Self-Heating ».

Je tiens tout d'abord à remercier les membres du jury d'avoir accepté d'évaluer ces travaux de thèse. Je remercie ainsi Fabrice Barbe d'avoir accepté la présidence de mon jury. Merci également à Lionel Gélébart et à Fabrice Barbe pour avoir accepté le rôle de rapporteurs, ainsi que pour les échanges enrichissants lors de la soutenance. Je remercie également André Chrysochoos et Pascale Kanouté pour les discussions lors de la soutenance. Je tiens aussi à remercier tout particulièrement Philippe Pilvin, que j'ai eu l'occasion de rencontrer lors de plusieurs conférences en France et qui a également participé à l'évaluation de mon comité de suivi individuel (CSI). J'ai eu l'honneur de sa présence lors de ma soutenance de thèse. Je remercie également Lionel Marcin et Florent Bridier pour avoir examiné ces travaux, mais aussi pour leur implication dans cette chaire industrielle, notamment à travers leur participation au comité d'orientation stratégique (COS).

Je voudrais ensuite remercier mon équipe d'encadrement pour la confiance qu'elle m'a accordée en me proposant ce sujet de thèse. Je remercie tout particulièrement Sylvain Calloch, grand architecte du projet de la chaire industrielle Self-Heating et de cette thèse, qui m'a accompagné pendant ces quatre années en tant que directeur de thèse et responsable du master que j'ai réalisé à l'ENSTA. Il a joué un rôle essentiel dans le développement de mon intérêt pour la recherche, en rendant cette démarche accessible et stimulante. Sur le plan personnel, il m'a également donné de précieux conseils sur la manière de se comporter et de se positionner dans le monde professionnel en tant que doctorant.

Je remercie également Cédric Doudard, qui m'a beaucoup accompagné en me donnant des conseils précieux sur la démarche scientifique, souvent très fondamentale, propre au travail de thèse. Sur un plan plus personnel, nous partagions la foi, et nos discussions à ce sujet ont été très enrichissantes pour mon développement personnel.

Je tiens aussi à remercier Sylvain Moyne, véritable expert en simulations numériques. Sans lui, je n'aurais pas pu avancer dans l'aspect numérique de cette thèse, depuis les scripts Python de post-traitement jusqu'aux simulations complexes réalisées sur Abaqus et Amitex. Sur le plan personnel, nous partagions également le goût des bandes dessinées et des jeux de société.

Enfin, je remercie Luc Saint-Sulpice, qui m'a également beaucoup aidé à travers plusieurs discussions professionnelles concernant l'avancement du projet.

Je souhaite aussi remercier aux permanents du laboratoire IRDL (Mathieu L., Mathieu D., Younès, Shabnam, Nicholas C., Nicholas J.,Guilhem, Bruno, Lorenzo, Celia, Yann,Vincent) et mes collègues doctorants que j'ai eu la chance de côtoyer pendant ces années : Kevin (grand

amateur de jeux de société et ancien colocataire), Justin (ami de bureau et compagnon de nombreuses parties de jeux), Tom (le grand maître pâtissier et ami des jeux de société), Thibaud (le spécialiste de la pêche à Brest), Arthur (toujours très gentil et excellent camarade de jeux), Otavio (le Brésilien le plus français de l'IRDL), Alexis M., Théo, Mathilde R., Mathilde C., Nicholas, Bruno, Léo, Jeanne, Antony, Sorina, Oscar, Alan, Alexis, Estelle, Mounir, Imad, Lucie, Lucille, Vincent, Pierrick, Enora, Farrel, Louka, Thibault, Juliette et Tom.

Je ne peux pas oublier la personne qui a permis que cette aventure commence. Je remercie tout particulièrement Nadège Bouchonneau, ancienne coordinatrice du programme d'échange académique. Grâce à la confiance qu'elle m'a accordée, j'ai pu réaliser cet échange académique en France.

Je tiens également à remercier Dieu et ma famille, en particulier ma mère Cristina, mon père Eduardo et ma sœur Roberta, qui m'ont apporté tout le soutien nécessaire dans les moments les plus difficiles de ma thèse. J'ai eu l'honneur et la grande joie de voir mes parents se déplacer jusqu'à Brest pour assister à ma soutenance.

Je voudrais aussi remercier les autres membres de ma famille qui ont contribué à construire mon caractère : ma grand-mère Vilma (in memoriam), qui était toujours très fière de mon parcours en France, ma grand-mère Terezinha, mon grand-père Roberto (in memoriam) et mon grand-père Eduardo (in memoriam), ainsi que tous les autres membres de ma famille.

Enfin, je souhaite remercier toutes les autres personnes qui m'ont soutenu durant cette thèse, notamment mes collègues brésiliens, les communautés catholiques et les étudiants internationaux à Brest.

Boa leitura ! (bonne lecture)

Table des matières

Sommaire

Remerciements i

Table des matières iii

Tables des figures vii

Liste des tableaux xvii

Introduction 1

Chapitre 1 : Modèle probabiliste à 2-échelles et mesures d'auto-échauffement sous sollicitation cyclique 7

Introduction 8

1.1. Fatigue des matériaux : un problème majeur 9

1.2. Méthode basée sur l'analyse de l'auto-échauffement sous chargements cycliques 10

1.2.1. Contexte de l'analyse de l'auto-échauffement au service de l'étude de la fatigue des matériaux 10

1.2.2. Protocole d'un essai d'auto-échauffement 13

1.2.3. Cadre thermodynamique pour l'analyse d'une courbe d'auto-échauffement 14

1.2.4. Estimation de la limite d'endurance à partir de la courbe d'auto-échauffement 19

1.2.5. Observations expérimentales des mécanismes à l'origine de l'AE 21

1.3. Modèle probabiliste à deux échelles 25

1.3.1. Représentation du matériau (VER) 26

1.3.2. Comportement et dissipation de la matrice 27

1.3.3. Comportement et dissipation d'un site 29

1.3.4. Calcul de la dissipation cyclique totale 31

1.3.5. Prévoir le comportement en fatigue à partir des ingrédients des courbes d'auto-échauffement 33

1.4. Objectifs de l'étude 37

Chapitre 2 : Homogénéisation numérique de l'agrégat polycristallin 41

Introduction 42

2.1. Génération des agrégats polycristallins 43

2.1.1. Génération de la *tessellation* 43

2.1.2. Distribution des orientations cristallographiques 45

2.2. Loi de comportement en plasticité cristalline 48

2.2.1. Historique des modèles en plasticité cristalline 48

2.2.2. Présentation de la loi de comportement 49

2.3. Homogénéisation numérique 52

2.3.1. Méthode de champs complets : FEM versus FFT 52

2.3.2. Homogénéisation basée sur la Transformé de Fourier Rapide (FFT) 53

2.3.3. Schéma d'intégration implicite de la loi 55

2.4. Agrégat polycristallin : Chargement uniaxial de traction-compression 56

2.4.1. Comportement mésoscopique : évolution de la contrainte nominale 57

2.4.2. Influence du raffinement du maillage 61

2.4.3. Influence du nombre de tirages des orientations sur la dissipation moyenne par cycle 65

2.4.4. Influence du nombre de grain sur la dissipation moyenne par cycle 66

2.4.5. Influence des paramètres de la loi de comportement 68

2.4.6. Influence des conditions limites 69

2.5. Conclusion 72

Chapitre 3 : Étude de la dissipation cyclique d'un agrégat polycristallin 75

Introduction 76

3.1. Agrégat polycristallin soumis à un chargement uniaxial de traction-compression 77

3.1.1. Apparition progressive de la microplasticité 77

3.1.2. Influence du tirage des orientations sur l'activation du glissement plastique 84

3.1.3. Évolution de la dissipation intrinsèque moyenne par cycle 86

3.2. Influence de l'anisotropie élastique et de l'écrouissage cinématique linéaire sur le comportement mécanique des matériaux 90

3.2.1. Influence de l'anisotropie élastique 90

3.2.2. Influence du paramètre de l'écrouissage cinématique linéaire ($\boldsymbol{c}$) 92

3.3. Construction d'une surface d'iso-dissipation 93

3.3.2. Conclusion Intermédiaire 97
3.4. Indicateurs de Fatigue (FIP) 98
3.4.1. Introduction bibliographique 99
3.4.2. FIP basée sur le glissement cumulé ($\Delta \boldsymbol{\nu}$) 100
3.4.3. Évolution du glissement plastique par voxel 100
3.4.4. Évolution du glissement plastique par grain 103
3.4.5. Distribution statistique du FIP 105
3.5. Conclusion 108
Chapitre 4 : Étude de la dissipation cyclique d'un agrégat polycristallin avec lamelles 111
Introduction 112
4.1. Génération de lamelles dans les grains d'un agrégat polycristallin 113
4.2. Analyse de l'apparition progressive de la microplasticité 116
4.2.1. Glissement cumulé par grain et par lamelle 116
4.2.2. Influence de la contrainte cisaillement critique résolue sur la dissipation moyenne par cycle 119
4.2.3. Influence de l'épaisseur des lamelles sur la dissipation moyenne par cycle 121
4.2.4. Influence du raffinement du maillage 122
4.3. Évolution de la dissipation intrinsèque moyenne par cycle 126
4.3.1. Influence du nombre de tirage d'orientations sur l'activation du glissement plastique 126
4.3.2. Analyse de la dissipation moyenne par cycle 127
4.3.3. Conclusion intermédiaire 131
4.4. Indicateurs de Fatigue (FIP) 132
4.4.1. Évolution du glissement plastique par grain 133
4.4.2. Évolution du glissement plastique par lamelle 134
4.4.3. Distribution statistique du FIP 135
4.4.4. Influence du nombre de tirages sur la dispersion des histogrammes de fatigue d'un polycristal 137
4.5. Conclusions 138
Chapitre 5 : Modélisation du régime primaire d'auto-échauffement 141
Introduction 142
5.1. Loi de comportement en plasticité cristalline : régime primaire et secondaire . 143
5.1.1. Présentation de la loi de comportement considérée 143
5.1.2. Schéma d'intégration semi-implicite de la loi 145

5.1.3. Étude de la loi 1D 150
5.2. Agrégat polycristallin soumis à un chargement uniaxial de traction-compression 151
5.2.1. Comportement mésoscopique : évolution de la contrainte nominale 151
5.2.2. Évolution de la dissipation intrinsèque moyenne par cycle 152
5.3. Influence des paramètres de la loi de comportement 155
5.3.1. Influence de m_2 155
5.3.2. Influence de T^0 et C_2/D_2 158
5.3.3. Influence de C_2 et D_2 161
5.4. Influence d'un état initial non-vierge 165
5.4.1. Évolution de la contrainte nominale 165
5.4.2. Évolution de la dissipation moyenne par cycle 166
5.4.3. Influence du temps de pause sur la dissipation moyenne par cycle 167
5.5. Influence d'une pré-déformation plastique 169
5.6. Conclusion 171
Conclusions et perspectives 173
Conclusions 173
Perspectives 175
Bibliographie 179

Tables des figures

Figure 1. Méthode de l'auto-échauffement, modèle probabiliste à deux échelles et courbe S-N-P et l'agrégat polycristallin 2
Figure 2. Méthode de l'auto-échauffement, modèle probabiliste à deux échelles et courbe S-N-P 8
Figure 3. Mise en évidence de la corrélation entre la limite d'endurance obtenue par la méthode thermique et celle obtenue classiquement (adapté de (Moore & Kommers, 1921)) 11
Figure 4. Nombre de publications par an référencées sur Scopus pour les termes : « fatigue & self-heating, fatigue & intrinsic dissipation, fatigue & heat build-up, fatigue & thermography & dissipation », avec pour comparaison le nombre de publications pour le terme « fatigue » dans le domaine « Engineering » ou « Materials Science » (Lepitre, 2024) 12
Figure 5. (a) Procédure expérimentale pour la méthode d'auto-échauffement, (b) évolution de la température moyenne pour $\Sigma 0i = \Sigma 0n$, (c) évolution de la température moyenne stabilisée (adapté de (Munier et al., 2014)) 14
Figure 6. Courbes d'auto-échauffement pour plusieurs alliages métalliques (a) Acier 300M (Lepitre, 2024) (b) acier ML340 (Sévédé, 2025) et (c) superalliage monocristallin à base de Ni (Mion et al., 2025) 18
Figure 7. Résultat de l'identification du modèle probabiliste à deux échelles de l'IRDL à partir des résultats d'un essai d'auto-échauffement sous sollicitation cyclique sur l'acier 300M à R = -1 (représentation dans un diagramme linéaire) (Lepitre, 2024) 20
Figure 8. Résultat de l'identification du modèle probabiliste à deux échelles de l'IRDL à partir des résultats d'un essai d'auto-échauffement sous sollicitation cyclique sur l'acier 300M à R = -1 (représentation dans un diagramme log-log) (Lepitre, 2024) 20
Figure 9. Détermination de la limite d'endurance, $\Sigma\infty$, à partir de l'évolution du second régime d'auto-échauffement sous sollicitation cyclique. Application à l'acier 300M à R = -1. (Lepitre, 2024) 20
Figure 10. (a) Représentation de la désorientation locale présente pendant le régime primaire après 20 000 cycles et (b-c) Apparition progressive de bandes de glissement persistantes sur la surface à 240 MPa et 330 MPa (adapté de (Munier et al., 2017)) 23
Figure 11. (a) Représentation de la désorientation locale présente à 160 MPa et 215 MPa (a-b). Apparition progressive de bandes de glissement persistantes sur la surface à 0 MPa, 200 MPa et 125 MPa (adapté de (Amini, 2021)) 23
Figure 12. Nombre de BGPs moyen sur la surface en fonction de l'amplitude de chargement pour un acier HSLA420 (Munier, 2012). 24
Figure 13. Distribution des orientations cristallographiques (a-b) et distribution du Facteur de Schmid (c-d) (adapté de (Amini, 2021) 24

Figure 14. Modèle probabiliste à deux échelles et ses étapes élémentaires 25
Figure 15. Méthode de l'auto-échauffement, modèle probabiliste à deux échelles et courbe S-N-P et l'agrégat polycristallin 37
Figure 16. (a) Microstructure voxelisée en 3D. (a) Carte de figure de pôle inverse référencée selon la direction de chargement, obtenue à partir de mesures EBSD de surface après déchargement de l'éprouvette ayant subi une déformation plastique macroscopique de 1,26 %. (b) Reconstruction 3D des données de l'expérience TriBeam provenant d'une région contenant un sous-ensemble de la surface libre indiquée par le cadre noir en (a). à partir du logiciel DREAM.3D (Stinville et al., 2022) 43
Figure 17.(a) Disposition aléatoire de points dans l'espace, (b) génération des germes à partir d'une distance à points fixes, (c) construction finale des polyèdres de Voronoï 45
Figure 18. Exemple d'un VER contenant 625 grains (a), distribution correspondante des diamètres des grains (b) et distribution des orientations correspondante issue d'une figure pôle inverse (c). μ et σ représentent respectivement la valeur moyenne et l'écart-type du logarithme naturel du diamètre des grains. Dg fait référence à la valeur moyenne du diamètre des grains, et CV correspond au coefficient de variation 45
Figure 19.(a) Agrégat polycristallin constitué de 625 grains. (b) Schéma des angles d'Euler . 46
Figure 20. Distribution des tirages d'orientations cristallographiques basée sur les angles d'Euler pour 10 000 grains et l'option random sampling (a) et 625 grains avec l'option random sampling (b), (c) 625 grains et l'option uniform sampling, ainsi que les figures de pôles inverses associées (d),(e) (f), respectivement. La ligne pointillée rouge représente la densité moyenne de $\phi 1$ et de $\phi 2$. 47
Figure 21. Systèmes de glissement pour le monocristal (a) {1 1 0} <1 1 1> et (b) {2 1 1} < 1 1 1 >. 52
Figure 22.(a) Évolution de la contrainte nominale pour 1,5 cycles à 150 MPa et à 90 MPa et 1 tirage d'orientation. (b) Évolution de la contrainte nominale pour 90MPa et 1 tirage d'orientation. Chaque ligne représente une composante de contrainte du VER dans le repère global 58
Figure 23. Évolution de la contrainte nominale pour 1,5 cycles à (a) 90MPa et à (b)150 MPa et 30 tirages d'orientation. La ligne orange représente l'évolution du dernier tirage d'orientation et les lignes en gris représentent les 29 premiers tirages d'orientation. Le module d'Young moyen $E = 211{,}90 \pm 0.6\ GPa$ est calculé entre 0,01% et 0,03% de déformation macroscopique 58
Figure 24. Courbe contrainte - déformation pour 1,5 cycles à (a) 150 MPa et à (b) 90 MPa. Les valeurs locales (points en orange) sont représentées aux niveaux de déformation maximal et minimale à la fin du 1er cycle. 59
Figure 25. Distribution des états de contrainte, $\sigma zz,\ voxel$ à la fin du premier cycle pour une amplitude de contrainte de 90 MPa 60
Figure 26. Évolution du facteur de Schmid (FS), (a) pour $\sigma zz,\ grain$ et (b) $\varepsilon zz,\ voxel$ dans la direction z à la fin du 1er cycle sous une amplitude de contrainte de 90 MPa (c) schéma d'un système de glissement 61

Figure 27. Différents VERs (a) $23 \times 23 \times 23$ voxels, (c) $45 \times 45 \times 45$ voxels, (e) $90 \times 90 \times 90$ voxels, (g) $135 \times 135 \times 135$ voxels, (i) $180 \times 180 \times 180$ voxels..... 62
Figure 28. Évolution de $\sigma zz, grain$ et $\varepsilon zz, grain$ en fonction du nombre de voxels pour le grain le plus / le moins chargé dans la direction z à la fin du premier cycle 64
Figure 29.(a) $\sigma zz, grain$ et (b) $\varepsilon zz, grain$ en fonction du volume de grain pour différentes densités de voxels dans le VER de l'agrégat polycristallin 64
Figure 30. Évolution de $\sigma zz, grain$ en fonction du nombre de voxels pour 625 grains à la fin du premier cycle. L´évolution en points pleins représente $\sigma zz, grain$. Pour chaque box-plot, le point en bleu représente la moyenne et la ligne orange la médiane 65
Figure 31. Évolution de la dissipation moyenne par cycle en fonction du nombre de voxels. 65
Figure 32. Évolution de la dissipation moyenne par cycle à 90 MPa pour 625 grains et du coefficient de variation. L´évolution en points pleins représente la dissipation. Pour chaque box-plot, le point en bleu représente la moyenne et la ligne orange la médiane. L'évolution du coefficient de variation est donnée par les points en carré en vert..... 66
Figure 33. Agrégat polycristallin avec des nombres de grains variables entre (a) 216 grains, (b) 343 grains, (c) 512 grains, (d) 625 grains, (e) 729 grains, (f) 1000 grains et (g) 1331 grains pour un tirage d'orientation..... 67
Figure 34. Évolution de la dissipation moyenne par cycle en fonction du nombre de grains à 90 MPa pour 30 tirages d'orientation. Pour chaque box-plot, le point en bleu représente la moyenne et la ligne orange la médiane. 68
Figure 35. (a) Évolution de la courbe d'hystérésis de contrainte - déformation et (b) l'évolution de la dissipation moyenne par cycle pour des fréquences f de 0,025 Hz à 2,5 Hz à 90 MPa..... 69
Figure 36. Évolution de la courbe d'hystérésis de contrainte - déformation pour 20 cycles à f = 0,25 Hz. 69
Figure 37. Champs de contrainte à l'échelle du voxel pour la modélisation périodique et périodique avec surfaces libres à la fin du premier cycle 71
Figure 38. Évolution de la courbe hystérésis contrainte-déformation pour le cas avec les conditions limites périodiques et avec la surface libre..... 71
Figure 39. Comparaison de la dissipation accumulée dans un cycle pour le cas périodique et le cas avec les surfaces libres 72
Figure 40. Évolution du nombre de voxels plastifiés en fonction du seuil ($5 \times 10 - 4 - 1 \times 10 - 3$) pour un tirage d'orientation : (a) échelle linéaire, (b) échelle logarithmique. Évolution correspondante du volume plastifié à l'échelle du voxel : (c) échelle linéaire, (d) échelle logarithmique..... 79
Figure 41. (a) Répartition des voxels plastifiés pour un seuil de $7 \times 10 - 4$ à la fin d'un cycle : voxels plastifiés en jaune, voxels élastiques en vert. (b) Évolution du nombre de voxels plastifiés en échelle logarithmique avec un ajustement par spline. (c) Évolution de la pente locale pour un tirage d'orientation et de tessellation donné. 81
Figure 42. Évolution du nombre de grains plastifiés en fonction du seuil ($5 \times 10 - 5 - 2 \times 10 - 4$) pour un tirage d'orientation : (a) échelle linéaire, (b) échelle logarithmique.

Évolution correspondante du volume plastifié à l'échelle du grain : (c) échelle linéaire, (d) échelle logarithmique..... 82
Figure 43. (a) Répartition des grains plastifiés pour un seuil de $7 \times 10 - 5$ à la fin d'un cycle : grains plastifiés en jaune, grains élastiques en vert. (b) Évolution du nombre de grains plastifiés en échelle logarithmique avec un ajustement par spline. (c) Évolution de la pente locale pour un tirage d'orientation et de tessellation donné. 83
Figure 44. (a) Évolution du nombre de voxels plastifiés en échelle logarithmique avec un ajustement par spline. (b) évolution de la pente locale pour 30 tirages d'orientation et de tessellation. 84
Figure 45. (a) Évolution du nombre de grains plastifiés en échelle logarithmique avec un ajustement par spline. (b) évolution de la pente locale pour 30 tirages d'orientation et de tessellation. 85
Figure 46. Comparaison (a) de l'évolution du nombre de voxels plastifiés en pourcentage, en échelle logarithmique, avec un ajustement par spline et (b) l'évolution de la pente locale pour 1 et 30 tirages d'orientation et de tessellation. 85
Figure 47. Comparaison (a) de l'évolution du nombre de grains plastifiés en pourcentage, en échelle logarithmique, avec un ajustement par spline et (b) l'évolution de la pente locale pour 1 et 30 tirages d'orientation et de tessellation. 86
Figure 48.(a) Évolution de la dissipation moyenne par cycle pour un VER de 625 grains en échelle linéaire et (b) en échelle logarithmique avec un ajustement par spline. (c) Évolution de la pente locale pour un tirage d'orientation et de tessellation donné. 87
Figure 49. Dissipation moyenne par cycle et par voxel, ΔD pour différentes amplitudes de contrainte (a) 60 MPa, (b) 70 MPa, (c) 80 MPa et (d) 90 MPa. 88
Figure 50. Évolution de la dissipation moyenne par cycle en fonction de l'amplitude de chargement pour 625 grains et 30 tirages d`orientations. (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique. Pour chaque box-plot, le point en bleu représente la moyenne et la ligne orange la médiane. 89
Figure 51. Comparaison des pentes locales p associées au nombre de grains activés, au nombre de voxels plastifiés et à l'évolution de la dissipation, où asg correspond à l'activation des systèmes de glissement. 89
Figure 52. Nombre de voxels plastifiés pour un tirage d'orientation et un seuil de $7 \times 10 - 4$ (a), dissipation moyenne par cycle pour différents matériaux et facteur de Zener (b) échelle linéaire et (c) échelle logarithmique 91
Figure 53. Dissipation moyenne par cycle pour différents matériaux et différents facteurs de Zener (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique 92
Figure 54. Évolution de la dissipation moyenne par cycle pour des valeurs de c de 1000 à 100 000 (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique 92
Figure 55. (a) Protocole d'essais des surfaces d'iso-dissipation pour le deuxième régime..... 95
Figure 56. Évolution de la dissipation moyenne par cycle pour différentes directions de chargements et différents facteurs de Zener de 1(a), 1,7(b), 2,4(c) et 4,8(d). 96

Figure 57.Distribution des surfaces d'iso-dissipation pour différents niveaux de dissipation et facteurs de Zener de 1(a), 1,7(b), 2,4(c) et 4,8(d) 97
Figure 58. Schéma illustrant deux stratégies d'analyse de l'activation plastique à l'échelle du grain. (a) Pour chaque amplitude de contrainte $\Sigma 0$, les zones les plus plastifiées sont identifiées indépendamment dans le VER. La population de grains sélectionnés peut ainsi varier avec l'amplitude de chargement. (b) Les zones les plus plastifiées identifiées à $\Sigma 0$=90 MPa sont suivis pour différentes amplitudes de contrainte $\Sigma 0 \in$ [60,90] MPa, afin d'analyser l'évolution de leur activité plastique en fonction du chargement. 101
Figure 59. (a) Évolution du glissement cumulé maximal, $\Delta vvoxel, max$ (a) à chaque amplitude $\Sigma 0$ (b) à 90MPa. Sur la barre des couleurs, les 10 premiers indices des voxels plus plastifiés sont affichés. 102
Figure 60. Évolution du glissement cumulé maximal, $\Delta vvoxel, max$ pour chaque VER (a) voxel plus plastifié à chaque $\Sigma 0$ (b)voxel plus plastifié à 90 MPa. Sur la barre de couleurs, les indices de 30 VERs sont affichés. 102
Figure 61. Schéma illustrant deux stratégies d'analyse de l'activation plastique à l'échelle du grain. (a) Pour chaque amplitude de contrainte $\Sigma 0$, les zones les plus plastifiées sont identifiées pour 30 VERs. La population de grains sélectionnés peut ainsi varier avec l'amplitude de chargement. (b) Les zones les plus plastifiées identifiées pour 30 VERs à $\Sigma 0$=90 MPa sont suivis pour différentes amplitudes de contrainte $\Sigma 0 \in$ [60,90] MPa, afin d'analyser l'évolution de leur activité plastique en fonction du chargement. 103
Figure 62. (a) Évolution du glissement cumulé maximal, $\Delta vgrain, max$ (a) à chaque amplitude $\Sigma 0$ (b) à 90MPa. Sur la barre des couleurs, les 10 premiers indices des grains plus plastifiés sont affichés. 104
Figure 63. Évolution du glissement cumulé maximal, $\Delta vgrain, max$ pour chaque VER (a)grain plus plastifié à chaque $\Sigma 0$ (b)grain plus plastifié à 90 MPa. Sur la barre de couleurs, les indices de 30 VERs sont affichés. 104
Figure 64. Protocole de la distribution statistique du FIP 106
Figure 65. Distribution de l'amplitude nécessaire à l'activation plastique, selon l'approche par voxel pour des seuils compris entre $5 \times 10 - 4$ et $1 \times 10 - 3$.Les paramètres m et λ correspondent aux paramètres de la loi d'ajustement de Weibull. μ représente la moyenne et CV, le coefficient de variation. 107
Figure 66. Distribution de l'amplitude nécessaire à l'activation plastique, selon l'approche par grain pour des seuils compris entre $1 \times 10 - 5$ et $2 \times 10 - 4$.Les paramètres m et λ correspondent aux paramètres de la loi d'ajustement de Weibull. μ représente la moyenne et CV, le coefficient de variation. 107
Figure 67. (a) Comparaison entre les pentes locales associées à l'activation des systèmes de glissement à l'échelle du voxel ($pasg, voxels$), à la dissipation ($pdissipation$) et à la dispersion en fatigue ($pfatigue$), ainsi qu'à la plage de pentes expérimentales($pexpérimental \in [10,30]$) (Munier et al., 2014). Le seuil d'activation est fixé à $7 \times 10 - 4$. (b) Comparaison entre les pentes locales associées à l'activation des systèmes de glissement à l'échelle du grain ($pasg, grains$), à la dissipation ($pdissipation$) et à la dispersion en

fatigue ($pfatigue$), ainsi qu'à la plage de pentes expérimentales ($pexpérimental \in [10,30]$) (Munier et al., 2014). Le seuil d'activation est fixé à $7 \times 10 - 5$. 109
Figure 68. Corrélation entre le champ de déformation et la microstructure 3D : (a) Champ de déformation ε_{xx} issu du HR-DIC sur la zone analysée par TriBeam. (b) Fonction fa ajustant les champs DIC à la surface 3D. (c) Superposition du champ ε_{xx} sur la surface du modèle 3D (Stinville et al., 2022) 113
Figure 69. Schéma de l'agrégat polycristallin avec 625 grains et les paramètres géométriques 114
Figure 70. (a) Schéma explicatif sur le choix d'orientation des lamelles pour chaque grain, (b) exemple d'un agrégat polycristallin avec 625 grains et son chargement à partir de la modélisation par lamelles et (c) distribution de la contrainte de cisaillement critique résolue pour un tirage d'orientation 115
Figure 71. (a) Répartition des grains plastifiés pour un seuil de $7 \times 10 - 5$ à la fin d'un cycle : grains plastifiés en jaune, grains élastiques en vert. (b) Évolution du nombre de grains plastifiés en échelle logarithmique avec un ajustement par spline. (c) Évolution de la pente locale pour un tirage d'orientation et de tessellation donné. 117
Figure 72. (a) Lamelles plastifiées pour un seuil = $7 \times 10 - 4$ à la fin du 1er cycle. Lamelles plastifiées en jaune et voxels élastiques en vert et (b) Lamelles plastifiées dans l'échelle logarithmique. La ligne orange en pointillé représente l'ajustement linéaire entre 76 MPa et 90 MPa. (c) Évolution de la pente locale pour un tirage d'orientation et de tessellation donné 118
Figure 73. Évolution de la dissipation moyenne par cycle pour différents coefficients de variation CV entre 0 et 0,2 (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique. (c) Distribution de la contrainte de cisaillement résolue critique pour les CV de 0 à 0,2 120
Figure 74. Dissipation par cycle pour différents tirages de contrainte de cisaillement résolue à 90 MPa. 121
Figure 75. (a) Microstructure associée pour les différentes épaisseurs de lamelle (b) évolution de la dissipation moyenne par cycle pour différentes épaisseurs moyennes de lamelle comprises entre 0,009 à 0,054 mm en échelle logarithmique. 122
Figure 76. Différents VERs (a) 33×33×33 voxels, (c) 67×67×67 voxels, (e) 135×135×135 voxels, (g) 270×270×270 voxels. Et dissipation moyenne par cycle ΔD, associés (b-d-f-h) 123
Figure 77. Évolution de $\sigma zz, grain$ et $\varepsilon zz, grain$ en fonction du nombre de voxels pour le grain plus/moins chargé dans la direction z à la fin du premier cycle 124
Figure 78. (a) $\sigma zz, grain$ et (b) $\varepsilon zz, grain$ en fonction du volume pour différents nombres de voxels dans le VER de l'agrégat polycristallin 125
Figure 79. Évolution de la dissipation moyenne par cycle en fonction du nombre de voxels. 125
Figure 80. (a) Évolution du nombre de grains plastifiés en échelle logarithmique avec un ajustement par spline. (b) évolution de la pente locale pour 30 tirages d'orientation et de tessellation donnée. 126

Figure 81. (a) Évolution du nombre de lamelles plastifiées en échelle logarithmique avec un ajustement par spline. (b) Évolution de la pente locale pour 30 tirages d'orientation et de tessellation. 127
Figure 82. (a) Évolution du nombre de lamelles plastifiées dans l'échelle linéaire (a) et logarithmique (b) pour un seuil de $7 \times 10 - 4$. La ligne pointillée orange représente l'ajustement de la loi de puissance réalisé pour 64 MPa et 90 MPa 127
Figure 83.(a) Évolution de la dissipation moyenne par cycle pour un VER de 625 grains. La dissipation D est calculée pour chaque voxel à la fin du 1er cycle. (b) Dissipation moyenne par cycle dans l'échelle logarithmique. La ligne pointillé en orange représente l'ajustement linéaire entre 60 MPa et 70 MPa. (c) Évolution de la pente locale pour un tirage d'orientation et de tessellation donné. 128
Figure 84. Comparaison des pentes locales p associées au nombre de grains activés, au nombre de lamelles plastifiées et à l'évolution de la dissipation, où asg est un acronyme qui correspond à l'activation des systèmes de glissement. (a) 1 VER et (b) 30 VERs. 130
Figure 85. Dissipation cumulée par voxel pour différentes amplitudes de contrainte (a) 60 MPa, (b) 70 MPa, (c) 80 MPa et (d)90 MPa 130
Figure 86. Évolution de la dissipation moyenne par cycle en fonction de l'amplitude de chargement pour 625 grains et 30 tirages d`orientations. (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique. Pour chaque box-plot, le point en bleu représente la moyenne et la ligne orange la médiane. 131
Figure 87. Comparaison du champ de dissipation, ΔD par deux méthodes (a) zone sans lamelles et (b) zone avec lamelles avec un nombre de voxels de 135 x 135x 135 131
Figure 88. Comparaison de l'évolution de la dissipation intrinsèque moyenne de la zone sans lamelles avec $\tau 0$ constante et zone avec lamelles et $\tau 0$ variable avec une distribution normale (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique. 132
Figure 89. (a) Évolution du glissement cumulé maximal, $\Delta vgrain, max$ (a) à chaque amplitude $\Sigma 0$ (b) à 90MPa. Sur la barre des couleurs, les 10 premiers indices des grains les plus plastifiés sont affichés. Modélisation avec lamelles. 134
Figure 90. Évolution du glissement cumulé maximal, $\Delta vgrain, max$ pour chaque VER (a)grain le plus plastifié à chaque $\Sigma 0$ (b)grain le plus plastifié à 90 MPa. Sur la barre de couleurs, les indices des 30 VERs sont affichés. Modélisation avec lamelles. 134
Figure 91. (a) Évolution du glissement cumulé maximal, $\Delta vlamelle, max$ (a) à chaque amplitude $\Sigma 0$ (b) à 90MPa. Sur la barre des couleurs, les 10 premiers indices des lamelles les plus plastifiées sont affichés. Modélisation avec lamelles. 135
Figure 92. Évolution du glissement cumulé maximal, $\Delta vlamelle, max$ pour chaque VER (a)lamelle la plus plastifiée à chaque $\Sigma 0$ (b)lamelle la plus plastifiée à 90 MPa. Sur la barre de couleurs, les indices des 30 VERs sont affichés. Modélisation avec lamelles. 135
Figure 93. Distribution de l'amplitude nécessaire à l'activation plastique, selon l'approche par grain pour des seuils compris entre $1 \times 10 - 5$ à $2 \times 10 - 4$.Les paramètres m et λ correspondent aux paramètres de la loi d'ajustement de Weibull. μ représente la moyenne et CV, le coefficient de variation. 137

Figure 94. Distribution de l'amplitude nécessaire à l'activation plastique, selon l'approche par lamelle pour des seuils compris entre $5 \times 10 - 4$ à $1 \times 10 - 3$.Les paramètres m et λ correspondent aux paramètres de la loi d'ajustement de Weibull. μ représente la moyenne et CV, le coefficient de variation. 137
Figure 95. Distribution de l'amplitude nécessaire à l'activation plastique, selon l'approche par lamelle pour de seuil égal à $8 \times 10 - 4$.(a) 10 tirages (b) 20 tirages (c) 30 tirages et (d) 44 tirages. Les paramètres m et λ correspondent aux paramètres de la loi d'ajustement de Weibull. μ représente la moyenne et CV, le coefficient de variation. 138
Figure 96. (a) Comparaison entre les pentes locales associées à l'activation des systèmes de glissement à l'échelle du grain ($pasg, grains$), à la dissipation ($pdissipation$) et à la dispersion en fatigue ($pfatigue$), ainsi qu'à la plage de pentes expérimentales($pexpérimental \in [10,30]$) (Munier et al., 2014). Le seuil d'activation est fixé à $7 \times 10 - 5$. (b) Comparaison entre les pentes locales associées à l'activation des systèmes de glissement à l'échelle de la lamelle ($pasg, lamelles$), à la dissipation ($pdissipation$) et à la dispersion en fatigue ($pfatigue$), ainsi qu'à la plage de pentes expérimentales ($pexpérimental \in [10,30]$) (Munier et al., 2014). Le seuil d'activation est fixé à $7 \times 10 - 4$. 140
Figure 97. Protocole de détermination de C_2 et D_2, paramètres de la loi de Ohno-Wang.... 149
Figure 98. Évolution de l'écrouissage pour la loi 1d (a) $m2 \in$ {0, 1, 5, 10,100}, $C2 = 30 \times 106MPa$ et $D2 = 106$ (b) $m2$ =10, $C_2 \in$ {3, 30, 300} $\times$ 106MPa et $D_2 \in$ {0.1, 1, 10} $\times$ 106 (c) $m2$ = 10, $C2/D2 \in$ {40, 35, 30, 25, 20, 10} MPa et $D2 = 106$ 150
Figure 99. Évolution de la contrainte nominale en fonction de la déformation macroscopique pour 1,5 cycles, sous des amplitudes de contrainte de 90 MPa et de 150 MPa, pour un tirage d'orientation unique. Comparaison entre les lois de comportement de Méric-Cailletaud avec écrouissage de type Prager (PR) et de type Ohno–Wang (OW). 152
Figure 100. Évolution des boucles d'hystérésis contrainte–déformation pour une amplitude de 90 MPa et 5 cycles, à une fréquence de chargement f = 0,25 Hz pour la loi de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage de type Ohno–Wang (OW). 152
Figure 101. Évolution de la dissipation moyenne par cycle en échelle logarithmique de la dissipation moyenne par cycle pour chaque voxel, ΔD pour des amplitudes de 50 MPa, 56 MPa, 70 MPa, 80 MPa et 90 MPa. 153
Figure 102. Évolution de la dissipation moyenne par cycle pour un VER de 625 grains. (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique (c) évolution de la pente locale de la dissipation moyenne par cycle. 154
Figure 103. Comparaison de la dissipation moyenne par cycle. Loi de comportement de Méric-Cailletaud avec écrouissage du type Prager (PR) en ligne bleue et Ohno-Wang (OW) en ligne orange (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique pour un même tirage d'orientation et de tessellation. 155
Figure 104. Évolution de la contrainte nominale versus déformation nominale pour les lois de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage de type de Ohno-Wang (OW) et de type Prager (PR) pour $m2 \in$ {0, 1, 5, 10,100} et (b) et un zoom entre 70 et 90 MPa pour un chargement monotone de 90 MPa. 156

Figure 105. (a) Évolution de la contrainte nominale pour les lois de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage de type de Ohno-Wang (OW) et de type Prager (PR) pour $m2$ ∈ {0, 1, 5, 10,100} (b) et un zoom entre 20 à 80 MPa pour un chargement monotone de 90 MPa..... 156
Figure 106. (a) Évolution de la dissipation moyenne par cycle nominale pour la loi de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage de type de Ohno-Wang (OW) pour les valeurs de $m2 \in \{0, 1, 5, 10\}$ (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique (c) évolution de la pente du régime primaire et du régime secondaire (d) évolution de l'écart relatif de la pente moyenne. 157
Figure 107. Évolution de la contrainte nominale – déformation nominale pour les lois de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage de type de Ohno-Wang (OW) et de type Prager (PR) pour $T0$ ∈ {0, 5, 10, 15, 20, 30} MPa et $C2/D2$ ∈ {40, 35, 30, 25, 20, 10} MPa pour un chargement monotone de 90 MPa. 159
Figure 108. (a) Évolution de la contrainte nominale – déformation plastique nominale pour les lois de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage de type de Ohno-Wang (OW) et de type Prager (PR) pour $T0$ ∈ {0, 5, 10, 15, 20, 30} MPa et $C2/D2$ ∈ {40, 35, 30, 25, 20, 10} MPa (b) et un zoom entre 20 et 80 MPa pour un chargement monotone de 90 MPa. 159
Figure 109. (a) Évolution de la dissipation moyenne par cycle pour une loi de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage du type Ohno-Wang (OW) pour des valeurs de $T0$ ∈ {0, 5, 10, 15, 20, 30} MPa et $C2/D2$ ∈ {40, 35, 30, 25, 20, 10} MPa (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique (c) évolution de la pente du régime primaire et du régime secondaire 161
Figure 110. Évolution de la contrainte nominale – déformation nominale pour les lois de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage de type Ohno-Wang (OW) et de type Prager (PR) pour des valeurs de C_2 ∈ {3, 30, 300} × 106MPa et D_2 ∈ {0.1, 1, 10} × 106. 162
Figure 111. (a) Évolution de la contrainte nominale – déformation plastique nominale pour les lois de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage de type Ohno-Wang (OW) et de type Prager (PR) pour des valeurs de C_2 ∈ {3, 30, 300} × 106MPa et D_2 ∈ {0.1, 1, 10} × 106 (b) et un zoom entre 20 et 80 MPa pour un chargement monotone de 90 MPa 163
Figure 112. (a) Évolution de la dissipation moyenne par cycle pour la loi de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage du type Ohno-Wang (OW) pour des valeurs de C_2 ∈ {3, 30, 300} × 106MPa et D_2 ∈ {0,1, 1, 10} × 106MPa (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique (c) variation de la pente pour les régimes primaire et secondaire 164
Figure 113. Contrainte nominale en fonction du temps (a) et boucles d'hystérésis contrainte – déformation (b) pour la précharge (bleu) et le chargement cyclique (orange). Dans (a), 20 cycles sont représentés ; dans (b), les cycles intermédiaires apparaissent en gris et le dernier cycle en orange. Les amplitudes de contrainte sont de 150 MPa pour la précharge et de 90 MPa pour le chargement..... 166

Figure 114. (a) Comparaison de la dissipation moyenne par cycle pour un VER de 625 grains, représentée en échelle linéaire(a) et en échelle logarithmique (b), pour la loi d'écrouissage de type Ohno–Wang à partir d'un état vierge et d'un état préchargé à 150 MPa (évalué au 20ème cycle). (c) Évolution de l'erreur relative entre les cycles 19 et 20 pour un tirage d'orientation..... 167
Figure 115. Évolution de la dissipation moyenne par cycle pour une amplitude de contrainte de (a) 60 MPa, pour des temps de pause compris entre 0 s et 10 s, (b) de 90 MPa avec un temps de pause de 1 s et (c) de 60 MPa avec un temps de pause de 1 s. La courbe en pointillés noirs représente la dissipation moyenne par cycle obtenue sans précharge (état vierge) à la fin du 1ère cycle. 168
Figure 116. Contrainte nominale en fonction du temps (a-c) et courbe contrainte–déformation (b-d) (précharge en bleu (de 150 MPa avec $\varepsilon pi = 0{,}36\ \%$ pour (a-b) et de 200 MPa avec $\varepsilon pi = 0{,}87\ \%$ pour (c-d)) et chargement cyclique d'amplitude de 90 MPa en orange sauf dans (b-d) où les cycles intermédiaires apparaissent en gris et le dernier cycle en orange) 169
Figure 117. Effet d'une pré-déformation plastique sur les courbes d'auto-échauffement (Louge, 2019)..... 170
Figure 118. (a) Comparaison de la dissipation moyenne par cycle pour un VER de 625 grains, représentée en échelle linéaire(a) et échelle logarithmique (b), pour la loi d'écrouissage du type Ohno–Wang à partir d'un état vierge et d'un état préchargé à 150 MPa et 200 MPa (évalués au 20ème cycle). (c) Évolution de l'erreur relative entre les cycles 19 et 20 pour un tirage d'orientation et précharge avec $\varepsilon pi = 0{,}36\ \%$ et $\varepsilon pi = 0{,}87\ \%$.(d) Évolution de la pente du régime primaire et secondaire en fonction de εpi..... 171

Liste des tableaux

Tableau 1. Paramètres mécaniques retenus pour notre étude 52
Tableau 2. Paramètres pour l'étude de l'influence du nombre de grains 67
Tableau 3. Paramètres d'anisotropie pour des matériaux de facteur de Zener, Zn de 1 à 4,8 90
Tableau 4. Paramètres pour l'étude de l'influence de l'épaisseur de lamelle 121
Tableau 5. Paramètres de l'étude d'influence du raffinement du maillage pour le cas avec lamelles 122
Tableau 6. Paramètres élastiques et visco-plastiques du matériau virtuel de l'étude 149
Tableau 7. Paramètres de la loi d'écrouissage d'Ohno-Wang du matériau virtuel de l'étude 149
Tableau 8. Évolution de la pente pour le régime primaire et le régime secondaire pour la loi de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage de type Ohno-Wang (OW) pour les valeurs de $m2$ comprises entre 0 et 10. 158
Tableau 9. Évolution de la pente pour le régime primaire et le régime secondaire pour des valeurs de $T0 \in$ {0, 5, 10, 15, 20, 30} MPa et $C2/D2 \in$ {40, 35, 30, 25, 20, 10} MPa 160
Tableau 10. Valeurs de module d'Young apparent, E calculé entre 0,001% et 0,002% de la déformation nominale 162
Tableau 11. Évolution de la pente pour le régime primaire et le régime secondaire pour des valeurs de $C_2 \in \{3, 30, 300\} \times 106$ MPa et $D_2 \in \{0{,}1, 1, 10\} \times 106$ MPa 163
Tableau 12. Évolution de la pente pour le régime primaire et le régime secondaire pour les valeurs de $\varepsilon pi \in$ {0, 0,36, 0,87} 170

Introduction

La fatigue constitue une problématique majeure affectant de nombreux composants mécaniques soumis à des chargements cycliques. Elle résulte d'un endommagement progressif du matériau au fil des cycles. De nombreux paramètres influencent le dimensionnement en fatigue, tels que la microstructure, la présence de contraintes résiduelles, le type et l'historique du chargement, ainsi que les conditions d'exploitation de la pièce (Schijve, 2003; Suresh, 1998).

Pour prendre en compte l'ensemble de ces paramètres dans la caractérisation des propriétés en fatigue d'un matériau, une démarche expérimentale classique nécessiterait un nombre d'essais très élevé. Une piste de recherche, alliant questions fondamentales et intérêts industriels, consiste à essayer d'accélérer les essais de fatigue.

Afin d'éviter la parallélisations des essais ou l'utilisation de fréquences de sollicitation trop élevées, des méthodes de caractérisation rapide, telles que la mesure de l'auto-échauffement (AE) sous chargement cyclique, peuvent être mises en œuvre (Catalbiano et al., 1984; Chrysochoos & Louche, 2000; De Finis et al., 2015; Doudard et al., 2005; Geraci et al., 1992; Krapez et al., 2000; M. P. Luong, 1998; Munier et al., 2014; Stromeyer, 1914). La philosophie d'un essai d'auto-échauffement diffère de celle d'un essai de fatigue classique car il ne s'agit plus de détecter l'évènement « rupture » ou « amorçage de fissures », mais d'évaluer la dissipation intrinsèque associée aux mécanismes responsables de l'endommagement en fatigue. De plus, par rapport à l'approche traditionnelle où seul le site responsable de la ruine est caractérisé, l'ensemble des sites potentiels de l'éprouvette participe à la signature thermique. Ainsi, un seul essai peut fournir une information globale sur les mécanismes d'amorçage, et la dispersion, inhérente aux propriétés en fatigue à grand nombre de cycles (HCF), est également reflétée dans la réponse thermique. À titre d'exemple, là où une trentaine d'éprouvettes peuvent être requises dans une campagne classique (ce qui représente un coût temporel et matériel important) car un essai de 2×10^6 cycles à 10 Hz peut durer plus de deux jours, les essais d'auto-échauffement permettent, quant à eux, une caractérisation beaucoup plus rapide en réduisant considérablement ce temps d'essai.

La méthode d'AE consiste à appliquer au matériau des blocs de chargement cyclique de plus en plus intenses (Figure 1(a)). L'auto-échauffement induit entraîne une élévation de la température de l'éprouvette, et cette augmentation, lors de l'essai, peut être reliée à la dissipation intrinsèque pour un niveau de chargement donné (Dillon, 1963). Ensuite, il est possible de tracer une courbe représentant l'évolution de la dissipation par cycle : la courbe

d'auto-échauffement. Deux régimes sont typiquement observés pour une majorité d'alliages métalliques : un régime primaire, à faibles amplitudes, et un régime secondaire, à amplitudes plus élevées mais inférieures à la limite élastique macroscopique.

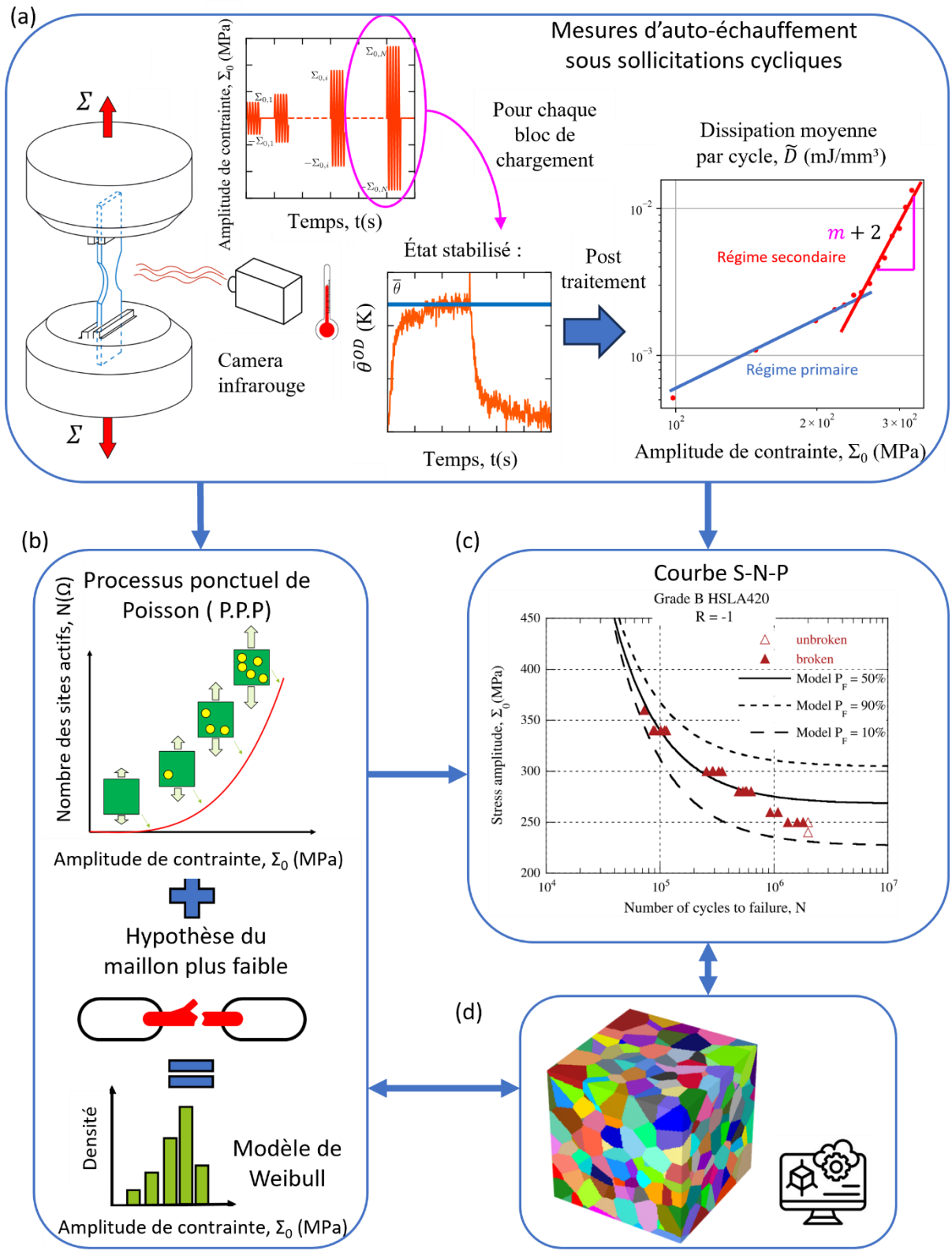


Figure 1. Méthode de l'auto-échauffement, modèle probabiliste à deux échelles et courbe S-N-P et l'agrégat polycristallin

La méthode de l'auto-échauffement a déjà été utilisée pour caractériser une large gamme de matériaux, notamment métalliques (aluminium, titane, superalliages, alliages monocristallins, cupro-aluminium, NiTi, aciers à haute limite d'élasticité) (Ezanno et al., 2013; Krapez et al., 2000; La Rosa & Risitano, 2000; Mion et al., 2025; Sévédé et al., 2024) et composites (stratifiés, tissés, cordages, mousses) (de Almeida et al., 2025; Demilly et al., 2024; Jia et al., 2023; Kordatos et al., 2013; Kwiatkowski et al., 2023; Le Saux et al., 2010; P. Luong, 2000; Najd et al., 2022). Dans ce manuscrit, elle sera appliquée aux alliages métalliques.

Pour étudier l'origine de ces phénomènes dissipatifs, des modèles ont été proposés. Le volume élémentaire représentatif (VER) (Figure 1(b)) est constitué d'une matrice élastoplastique et d'une distribution aléatoire de sites où la plasticité se localise au comportement identique à la matrice tant qu'ils n'ont pas été activée. Ils sont considérés comme des signes de la microplasticité (Doudard, 2004; Munier, 2012). Leur activation est décrite à l'aide d'un Processus Ponctuel de Poisson (P.P.P) (Denoual & Marquis, 1998; Doudard et al., 2005; Jeulin, 1991). Il a par ailleurs été établi qu'une loi puissance peut décrire l'activation de ces sites (Cugy & Galtier, 2002; Doudard et al., 2005; Munier et al., 2014).

Cette formulation rend compte de la forme des courbes d'auto-échauffement observées expérimentalement : l'intensité du premier régime est associée à la dissipation de la matrice, tandis que celle du second régime reflète l'activité dissipative de la population des sites. De plus, le cadre du P.P.P. couplé à l'hypothèse du maillon plus faible, permet d'établir une distribution des limites d'endurance décrite par une loi de Weibull (Weibull, 1951). En considérant un critère énergétique, il est alors possible de décrire les courbes S-N-P (Figure 1(c)). Ce modèle a été validé pour de nombreux alliages métalliques et sous divers chargements.

Bien que macroscopique, le modèle repose sur des observations microscopiques. Dans le régime primaire, les observations par microscopie optique et diffraction d'électrons rétrodiffusés (EBSD), après application d'un grand nombre de cycles, ont révélé une désorientation intra-granulaire dans la majorité des grains. Celle-ci est liée à la microplasticité, résultant du mouvement et de l'accommodation des dislocations. Toutefois, ce phénomène apparaît de manière diffuse et pour des niveaux de chargement bien inférieurs à la limite d'endurance moyenne (Amini, 2021; Munier, 2012).

Dans le régime secondaire, à la surface de l'éprouvette des bandes de glissement persistantes (BGPs) répartis de façon aléatoire apparaissent progressivement sous chargement cyclique, à mesure que l'amplitude augmente. Elles entraînent également une évolution du relief de surface ainsi que des modifications microstructurales (Mughrabi, 2009; Polák, 2023).

Pour analyser directement le comportement mécanique à l'échelle de la microstructure, l'homogénéisation numérique par champs complets s'est avérée comme une

approche pertinente, rendue possible grâce aux progrès récents des méthodes et moyens numériques (A. Lebensohn, 2001; Barbe et al., 2001; Méric et al., 1991; Miehe et al., 1999). Elle permet d'établir un lien entre la microstructure et la réponse macroscopique, en modélisant par exemple l'influence de l'anisotropie élastique, de la distribution des orientations cristallographiques, de la loi de comportement, de la texture ou de la taille des grains.

C'est dans ce contexte que s'inscrit le présent manuscrit. L'objectif principal est d'étudier le lien entre les mesures d'auto-échauffement et les propriétés en fatigue via l'analyse numérique du comportement mécanique d'agrégats polycristallins sous sollicitations cycliques (Figure 1(d)). Il s'agira tout d'abord de proposer un cadre permettant de décrire les courbes d'auto-échauffement typiques de la littérature, puis de proposer une approche permettant de décrire le comportement en fatigue de tels agrégats, et enfin d'établir un éventuel lien entre les deux. A chaque étape, un dialogue avec le modèle probabiliste à deux échelles sera établi afin d'en faire une analyse critique.

Plus précisément, les simulations numériques d'agrégats polycristallins sont exploitées afin d'analyser l'évolution de la dissipation sous chargement cyclique de faible amplitude, tant du point de vue qualitatif que quantitatif. Elles permettent d'évaluer la pertinence des hypothèses du modèle probabiliste à deux échelles, d'examiner la signification physique d'un « site d'activation plastique » et d'étudier le scénario d'apparition de ces sites, en analysant leur distribution, leur séquence d'activation et leur contribution à la dissipation globale. De plus, la comparaison entre la pente du régime secondaire des courbes d'auto-échauffement et celle de l'évolution du nombre de sites actifs constitue un élément central pour apprécier la cohérence entre les descriptions énergétique et statistique de l'activation plastique (Figure 1). Enfin, une analyse critique de l'hypothèse du maillon le plus faible dans le cadre du polycristal, est également mené.

Le manuscrit est structuré en cinq chapitres :

- Chapitre 1 : état de l'art sur la caractérisation en fatigue à grand nombre de cycles des matériaux par AE ; rappel du modèle probabiliste à deux échelles reliant dissipation cyclique et durée de vie. Après avoir présenté les résultats expérimentaux existants, l'objectif est d'introduire le changement d'échelle jusqu'à l'échelle mésoscopique pour analyser la dissipation par simulations polycristallines.
- Chapitre 2 : présentation des agrégats polycristallins utilisés dans la suite du manuscrit. La loi de plasticité cristalline de type Méric–Cailletaud avec un écrouissage cinématique linéaire est présentée. L'étude des champs de contraintes, de la dissipation locale et moyenne, ainsi que l'influence du maillage, du nombre de grains et du choix des paramètres matériaux est réalisée.
- Chapitre 3 : étude de la dissipation moyenne par cycle pour différentes amplitudes de contrainte et d'apparition de la microplasticité au sein du VER. Le déclenchement du

glissement plastique est analysé par voxel et par grain. Une première tentative de mise en correspondance entre modèle probabiliste à deux-échelles et essais d'auto-échauffement est réalisée, ainsi qu'une discussion sur la nature des sites dans le modèle et sur la dispersion en fatigue.

- Chapitre 4 : introduction d'une échelle intermédiaire, la lamelle, entre celle du grain et celle du voxel, afin de mieux représenter les zones de localisation des déformations plastiques à l'image de celles à l'origine de la formation des bandes de glissement persistantes observées expérimentalement en surface. Cette échelle aide également à renforcer le lien entre le modèle probabiliste et le comportement polycristallin, et à proposer une interprétation physique de la notion de sites.
- Chapitre 5 : modification de la loi de Méric–Cailletaud avec l'introduction d'un second écrouissage cinématique non linéaire de type Ohno–Wang. Il est montré que cela permet de décrire le régime dissipatif à faibles amplitudes, c'est-à-dire le régime primaire. Une analyse de l'influence de l'historique de chargement est également menée.

Ces travaux de thèse s'inscrivent dans le cadre de la chaire industrielle « Self-Heating » en collaboration avec l'Agence Nationale de la Recherche, l'institut P' ainsi que Safran et Naval Group en partenaires industriels. Le but de cette chaire était d'améliorer la compréhension de l'auto-échauffement, étendre la méthode à différents matériaux et différentes sollicitations et d'exploiter ces mesures thermométriques pour la prévision des propriétés en fatigue HCF et VHCF.

Chapitre 1 : Modèle probabiliste à 2-échelles et mesures d'auto-échauffement sous sollicitation cyclique

Sommaire

Introduction 8
1.1. Fatigue des matériaux : un problème majeur 9
1.2. Méthode basée sur l'analyse de l'auto-échauffement sous chargements cycliques 10
1.2.1. Contexte de l'analyse de l'auto-échauffement au service de l'étude de la fatigue des matériaux 10
1.2.2. Protocole d'un essai d'auto-échauffement 13
1.2.3. Cadre thermodynamique pour l'analyse d'une courbe d'auto-échauffement 14
1.2.4. Estimation de la limite d'endurance à partir de la courbe d'auto-échauffement 19
1.2.5. Observations expérimentales des mécanismes à l'origine de l'AE 21
1.3. Modèle probabiliste à deux échelles 25
1.3.1. Représentation du matériau (VER) 26
1.3.2. Comportement et dissipation de la matrice 27
1.3.3. Comportement et dissipation d'un site 29
1.3.4. Calcul de la dissipation cyclique totale 31
1.3.5. Prévoir le comportement en fatigue à partir des ingrédients des courbes d'auto-échauffement 33
1.4. Objectifs de l'étude 37

Introduction

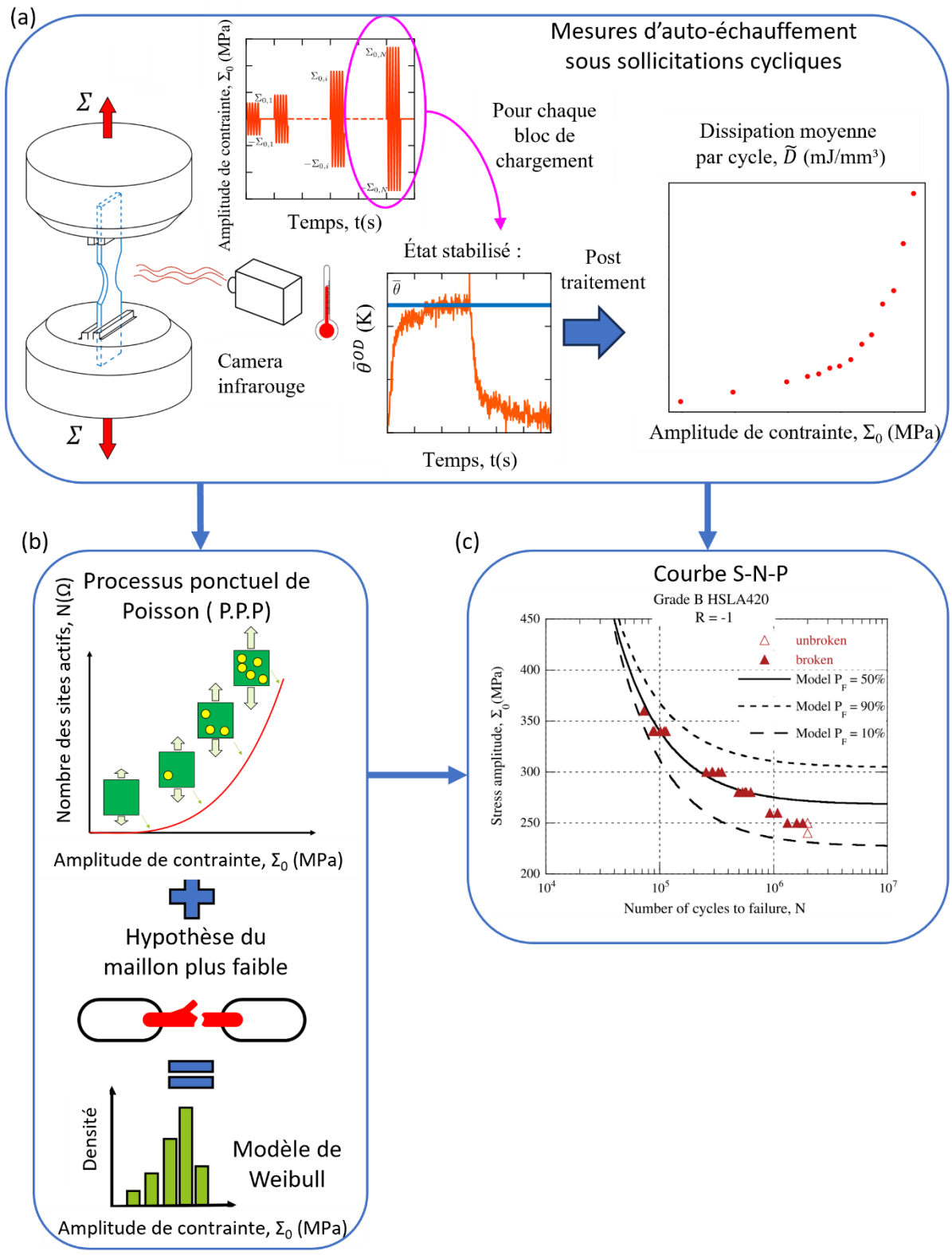


Figure 2. Méthode de l'auto-échauffement, modèle probabiliste à deux échelles et courbe S-N-P

Ce premier chapitre a pour objectif de présenter la méthode basée sur l'analyse de l'auto-échauffement sous sollicitions cycliques afin de rappeler la procédure expérimentale utilisée. Elle est une méthode alternative pour estimer la durée de vie en fatigue à grand nombre de cycle d'un matériau à partir de la signature thermique d'une éprouvette sous sollicitation mécanique alternée. Ensuite, le modèle probabiliste à deux échelles utilisé classiquement pour relier la dissipation cyclique à la durée de vie en fatigue du matériau sera rappelé (Figure 2).

1.1. Fatigue des matériaux : un problème majeur

Lorsqu'un matériau est soumis à des sollicitations cycliques, il peut, après un certain nombre de cycles, subir un endommagement interne progressif, pouvant conduire à une rupture catastrophique. Ce phénomène d'accumulation d'endommagement dû aux chargements cycliques est connu sous le nom de fatigue (Schijve, 2003; Suresh, 1998).

La fatigue à grand nombre de cycles demeure un problème industriel majeur. L'apparition des ruptures en service sous chargement cyclique a été observée dès le XIXe siècle. Ce phénomène s'est révélé complexe à appréhender, en raison de son caractère aléatoire et du fait qu'il survient sous des niveaux de charge inférieurs à la limite d'élasticité macroscopique des matériaux. Lorsqu'un matériau métallique est soumis à des sollicitations cycliques cela entraîne l'apparition de plasticité à l'échelle microscopique, également appelée microplasticité. Ce phénomène se développe progressivement, engendrant la formation de fissures. Ces dernières se propagent ensuite, entraînant la rupture de la structure. Pour caractériser le comportement en fatigue d'un matériau, des courbes S-N-P *(Stress - Number of cycles - Probability of failure*) sont utilisés (Figure 2(c)). Elles illustrent l'évolution du nombre de cycles à la rupture en fonction du niveau de chargement. Toutefois, en raison de la variabilité inhérente au phénomène de la fatigue, un nombre élevé d'échantillons est nécessaire pour obtenir un faisceau de courbes S-N-P fiable. En pratique, environ une trentaine d'éprouvettes sont requises, ce qui rend les essais coûteux tant en termes de matériel qu'en temps. La durée d'un essai de 2×10^6 cycles à 10 Hz peut dépasser plus de deux jours. Dans le cas de 30 éprouvettes, cela équivaudrait à environ 70 jours, si une seule machine est utilisée.

Chaque matériau possède des caractéristiques qui influencent sa tenue à la fatigue. Lors du dimensionnement d'une pièce, le choix du matériau constitue donc une étape clé. À l'échelle microscopique, la microstructure joue un rôle fondamental dans cette résistance (Chan, 2010; Mughrabi, 2009; Murakami, 2019; Sangid, 2013). De plus, l'existence de contraintes résiduelles au sein du matériau peut également modifier sa tenue en fatigue (McCLUNG, 2007; Webster & Ezeilo, 2001; Withers, 2007). Ces contraintes, introduites principalement lors des opérations de fabrication ou de mise en forme des pièces industrielles, peuvent avoir des effets bénéfiques ou néfastes, selon les conditions. Il est donc essentiel de

prendre en compte ces paramètres lors du dimensionnement en fatigue. À l'échelle de la pièce, de nombreux autres facteurs influencent la tenue en fatigue, notamment le type de chargement auquel elle sera soumise. Il est alors crucial de connaître précisément les conditions de sollicitation pour un dimensionnement optimal (Dowling, 1971; Fatemi & Socie, 1988; Suresh, 1998). Enfin, l'environnement d'exploitation de la pièce joue également un rôle déterminant. Par exemple, l'environnement marin, en raison de la salinité de l'eau, accélère le processus de corrosion, ce qui dégrade considérablement la résistance en fatigue du matériau (Fontana, 1985; Jaske et al., 1981; Suresh, 1998).

Pour intégrer tous ces paramètres dans la caractérisation des propriétés en fatigue d'un matériau, une méthode de caractérisation classique impliquerait un nombre d'essais excessif. Un challenge, ou plutôt une piste de recherche consiste alors à accélérer les essais. Cela peut se faire en ajustant deux variables principales : le nombre de machines de fatigue mise en œuvre et la fréquence de sollicitation appliquée. En augmentant le nombre de machines, il est possible de réaliser des essais en parallèle, ce qui permet d'obtenir les courbes S-N-P plus rapidement, mais cela engendre un coût supplémentaire (Dowling et al., 2019). L'autre option est d'augmenter la fréquence de sollicitation pour réduire le temps des essais. Sur des machines hydrauliques classiques, cette fréquence est généralement de quelques dizaines de hertz, tandis que sur des machines ultrasoniques, elle peut atteindre quelques kilohertz (Bathias & Paris, 2004; Stanzl-Tschegg, 2014). Cependant, une fréquence trop élevée peut « fausser » les résultats, car elle ne représente pas toujours les conditions réelles d'utilisation du matériau à grand nombre de cycles. Pour éviter de recourir à un grand nombre d'éprouvettes ou de solliciter le matériau à une fréquence inappropriée, des méthodes de caractérisation rapide, telles que les mesures d'auto-échauffement sous chargement cyclique, peuvent être également utilisées (Figure 2(a)).

1.2. Méthode basée sur l'analyse de l'auto-échauffement sous chargements cycliques

1.2.1. Contexte de l'analyse de l'auto-échauffement au service de l'étude de la fatigue des matériaux

Les travaux sur l'étude de la fatigue des matériaux ont été initiés dès le milieu du XIXe siècle (Wöhler, 1870). Au début du XXe, Stromeyer (Stromeyer, 1914) en travaillant notamment sur la fatigue sous sollicitations de flexion et torsion a constaté une augmentation de la température de l'éprouvette au-delà d'un certain niveau d'amplitude de contrainte par le biais des mesures différentielles, et il a établi un lien entre l'amplitude à partir de laquelle cet auto-échauffement (AE) était détecté et la limite d'endurance des aciers testés par Wöhler (limite d'endurance au sens ingénieur du terme, c'est-à-dire à 10^6 cycles environ). C'était le point de départ des études sur l'AE sous sollicitations cycliques des matériaux (Figure 2(a)).

Quelques années après cette première étude, les travaux menés par Moore et Koomers (Moore & Kommers, 1921), ont mis en évidence l'allure classique de l'élévation de la température moyenne stabilisée sous paliers croissantes de chargements et ont permis de proposer une méthode empirique de détermination de la limite d'endurance en la corrélant à un changement brusque de cette évolution (Figure 3). Lehr (Lehr, 1926) a confirmé ce lien. Il a visualisé un changement de régime du comportement du matériau avec la mise en évidence d'une ouverture progressive des boucles d'hystérésis sous chargements supérieurs à la limite d'endurance, mais inférieurs à la limite d'élasticité. Welter (Welter, 1937) a, quant à lui, analysé l'évolution de l'auto-échauffement tout au long de la durée de vie des éprouvettes, et a montré une augmentation de celui-ci à l'approche du point en rupture en fatigue. Ces différentes recherches ont permis d'établir un lien entre l'élévation de la température de l'éprouvette sous chargements cycliques et la fatigue. Après cette période initiale, peu d'études ont été menées, à l'exception de Cazaud (Cazaud, 1948) qui a rédigé un ouvrage de référence sur la fatigue dans lequel un chapitre a été dédié aux méthodes de caractérisation rapide.

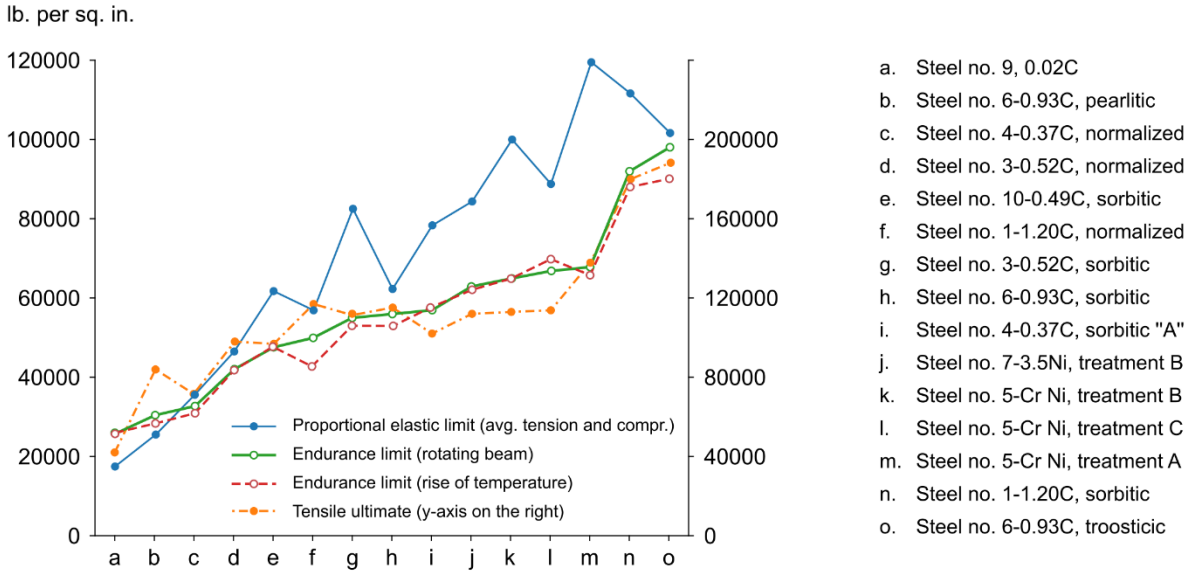


Figure 3. Mise en évidence de la corrélation entre la limite d'endurance obtenue par la méthode thermique et celle obtenue classiquement (adapté de (Moore & Kommers, 1921))

L'imagerie infrarouge, qui permet une mesure plus fine de l'élévation de température a ensuite contribué, avec son essor à la fin du XXe siècle, au renouveau et à la structuration de la méthode jusqu'à aujourd'hui (Catalbiano et al., 1984; Chrysochoos & Louche, 2000; De Finis et al., 2015; Doudard et al., 2005; Geraci et al., 1992; Krapez et al., 2000; M. P. Luong, 1998; Munier et al., 2014).

Plus récemment, depuis les années 2000, la méthode a été appliquée à une large gamme de matériaux métalliques (aluminium, titane, superalliages, alliages monocristallins, cupro-aluminium, NiTi, aciers à haute limite d'élasticité (Ezanno et al., 2013; Krapez et al., 2000; La Rosa & Risitano, 2000; Mion et al., 2025; Sévédé et al., 2024)) ainsi qu'aux matériaux

composites (stratifiés, tissés, cordages, mousses) (de Almeida et al., 2025; Demilly et al., 2024; Jia et al., 2023; Kordatos et al., 2013; Kwiatkowski et al., 2023; Le Saux et al., 2010; P. Luong, 2000; Najd et al., 2022)). En parallèle, plusieurs effets influençant le comportement en fatigue ont été étudiés via l'analyse de l'auto-échauffement : le rapport de charge, la multiaxialité du chargement, la pré-déformation plastique, l'influence du traitement de surface (Guellec, 2023; Lepitre et al., 2022; Louge et al., 2022; Munier, 2012; Poncelet et al., 2010; Prokhorov et al., 2021).

Aujourd'hui, comme évoqué par Lepitre (Lepitre, 2024) la recherche sur l'apport des mesures d'auto-échauffement au service de la fatigue est en pleine croissance (Figure 4), avec une dynamique remarquable depuis une dizaine d'années. Il est en effet notable que depuis 2015 une cinquantaine de publications annuelles sur le sujet sont publiés, un volume encore modeste comparé aux milliers de travaux consacrés à la fatigue des matériaux et des structures, mais qui témoigne de l'intérêt croissant de la communauté scientifique. Les principaux pays contributeurs historiques sont la France et l'Italie, suivi dans une moindre mesure par les États-Unis et l'Allemagne, ainsi que, plus récemment, par la Chine.

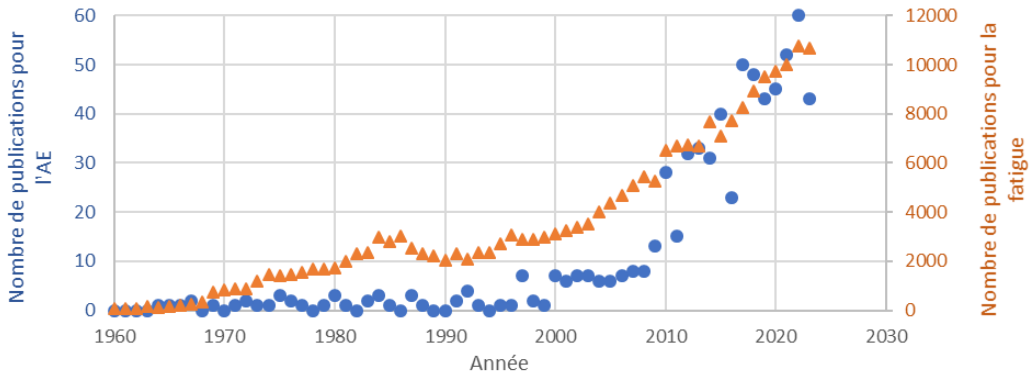


Figure 4. Nombre de publications par an référencées sur Scopus pour les termes : « fatigue & self-heating, fatigue & intrinsic dissipation, fatigue & heat build-up, fatigue & thermography & dissipation », avec pour comparaison le nombre de publications pour le terme « fatigue » dans le domaine « Engineering » ou « Materials Science » (Lepitre, 2024)

Quatre axes de recherche complémentaires structurent aujourd'hui les travaux en AE : 1. Métrologie et mesures thermométriques à partir de la mise en évidence expérimentale du phénomène, notamment grâce à l'imagerie infrarouge ; 2. Dépouillement sans modèle a priori à partir du champ de source ; 3. Modélisation du phénomène, qui permet d'alléger les dispositifs expérimentaux et de proposer des méthodes de post-traitement simples ; 4. Méthodes empiriques.

Dans un contexte de transfert industriel, cette troisième approche présente un intérêt particulier puisqu'elle peut reposer sur une instrumentation minimale (quelques thermocouples de type K et un outil de post-traitement de données basé sur des moyennes glissantes ou des lois simples, de type puissance et exponentielle (Lepitre, 2024)). L'utilisation

de caméras infrarouges reste possible, mais l'analyse peut être réduite à une valeur scalaire déterminée par moyenne spatiale des champs de température.

L'intérêt majeur de la mesure de l'auto-échauffement réside dans le gain de temps qu'elle offre par rapport aux essais de fatigue classiques, tout en fournissant une information riche sur le comportement en fatigue. La philosophie d'un essai d'AE diffère profondément de celle d'un essai classique : une éprouvette n'est plus considérée comme un individu d'une population mais comme un échantillon représentatif du matériau, intégrant un échantillon représentatif de l'ensemble des sites d'amorçage. Ainsi, un seul essai peut fournir une information globale sur les mécanismes d'amorçage et la dispersion inhérente aux propriétés en fatigue à grand nombre de cycles (HCF) qui est également reflétée dans la réponse thermique. L'interprétation de cette réponse repose aujourd'hui sur des modèles probabilistes, comme le modèle d'AE à deux mécanismes dissipatifs (Munier, 2012; Munier et al., 2014).

Dans un contexte industriel, et en particulier dans le domaine aéronautique, l'AE apparaît comme une méthode prometteuse pour réduire et compléter les campagnes d'essais classiques. Néanmoins, elle ne permet pas encore de s'y substituer totalement. Une validation par quelques essais de fatigue conventionnels demeure en effet indispensable afin de garantir la fiabilité des résultats dans des applications à forts enjeux de sécurité.

1.2.2. Protocole d'un essai d'auto-échauffement

Un essai d'auto-échauffement (Figure 5(a)) consiste à appliquer des blocs de chargement cyclique, en augmentant progressivement les niveaux d'amplitude de contraintes. Dans le cadre d'un matériau avec une énergie dissipée par cycle constante, l'élévation de la température moyenne de l'éprouvette suit une allure proche d'une exponentielle saturante comme montré dans la Figure 5(b). Cette élévation de température peut être obtenue soit par caméra infrarouge, soit au moyen de trois thermocouples : un positionné sur l'éprouvette, et les deux autres sur les mors permettant la réalisation d'une mesure différentielle en soustrayant l'évolution moyenne de l'environnement au cours de la sollicitation. Pour chaque bloc de chargement, une température moyenne stabilisé, $\overline{\theta}$ peut être obtenue.

Il est possible alors de tracer l'évolution de cette température moyenne stabilisée en fonction de l'amplitude du chargement (Figure 5(c)). Cette courbe est connue sous le nom de courbe d'auto-échauffement. Deux régimes peuvent être observés dans le cas présent : un régime primaire à faibles amplitudes et un régime secondaire à plus hautes amplitudes (mais encore inférieures à la limite élastique macroscopique).

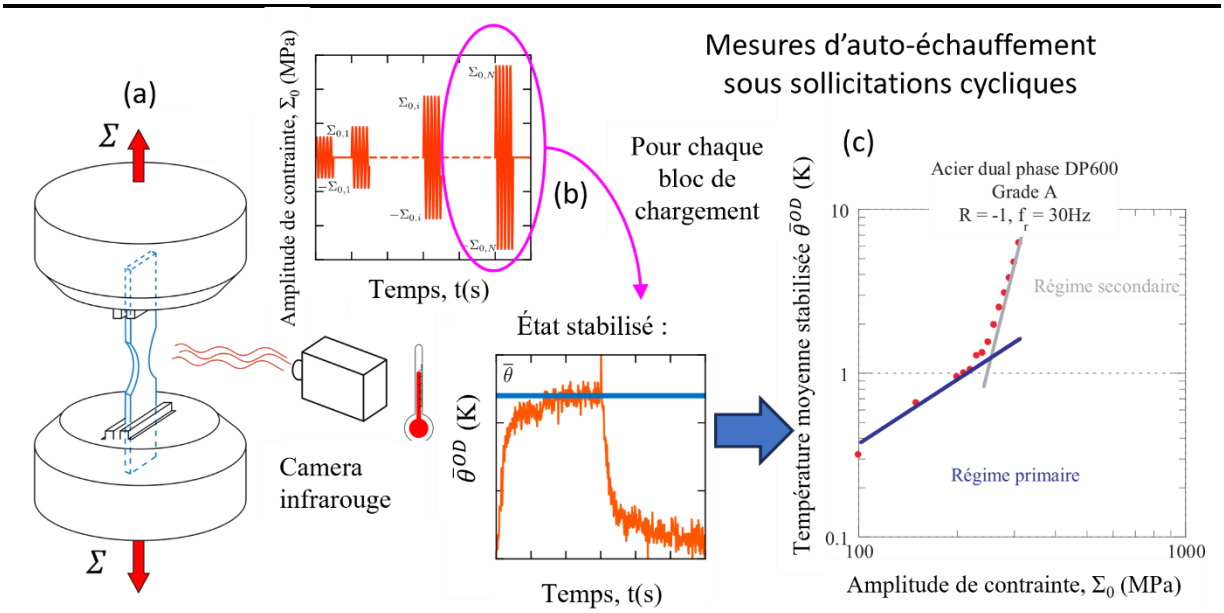


Figure 5. (a) Procédure expérimentale pour la méthode d'auto-échauffement, (b) évolution de la température moyenne pour $\Sigma_{0i}= \Sigma_{0n}$, (c) évolution de la température moyenne stabilisée (adapté de (Munier et al., 2014))

1.2.3. Cadre thermodynamique pour l'analyse d'une courbe d'auto-échauffement

Pour interpréter correctement les mesures d'auto-échauffement, l'analyse de la seule élévation de température ne suffit pas. En effet, celle-ci n'est pas une grandeur intrinsèque au matériau : elle dépend de nombreux paramètres expérimentaux tels que la géométrie de l'éprouvette, les conditions thermiques de l'environnement ou encore la fréquence de sollicitation (Munier, 2012; Sévédé, 2025). Il est donc nécessaire d'établir un lien entre la température mesurée et le champ source à l'origine de l'auto-échauffement, qui, lui, constitue une grandeur intrinsèque du matériau. Cette relation peut être obtenue grâce à la résolution de l'équation de la chaleur.

1.2.3.1. L'équation de la chaleur

L'équation de la chaleur est un outil important pour analyser les mesures de l'auto-échauffement. L'approche « 0D » ou approche moyenne sera détaillée dans la suite de cette section (Munier, 2012).

L'analyse des mesures d'auto-échauffement repose sur le cadre théorique de la thermodynamique des processus irréversibles. À un instant donné t, l'état thermodynamique d'un point M dans un matériau est défini par un ensemble de variables d'état, qui dépendent uniquement du point considéré. L'évolution de ce système est assimilée à une suite d'états d'équilibre. Les variables d'état comprennent, d'une part, les variables observables et, d'autre part, les variables internes. Parmi les variables observables, la température T est considéré ainsi que le tenseur des déformations $\underline{\underline{\varepsilon_t}}$, lequel peut être décomposé en une composante

élastique $\underline{\underline{\varepsilon_e}}$ et une composante plastique $\underline{\underline{\varepsilon_p}}$. Les variables internes, notées $\underline{\underline{V_k}}$ avec $k \in \{1, \dots, n\}$, complètent la description de l'état thermodynamique. Dans tous les cas, l'évolution du système doit satisfaire les principes fondamentaux de la thermodynamique, à savoir la conservation de l'énergie (premier principe) et l'inégalité de Clausius-Duhem (second principe) (Lemaitre & Chaboche, 1994). L'équation de la chaleur (Dillon, 1963),

$$\rho C_p \dot{T} + div(\vec{q}) = \rho C_p S_t = \Delta + r + \rho T \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \underline{\underline{\varepsilon_e}} \partial T} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}_e}} + \sum_k \rho T \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \underline{\underline{V_k}} \partial T} : \underline{\underline{\dot{V}_k}}, \qquad (1)$$

dérive de la formulation locale du premier principe de la thermodynamique (conservation de l'énergie), en considérant l'énergie libre d'Helmholtz, $\psi = e - Ts$, où e désigne l'énergie interne spécifique du système, s son entropie, ρ sa masse volumique et $C_p = -T\frac{\partial^2 \Psi}{\partial T^2}$ sa chaleur spécifique. L'évolution de la température locale dépend donc de plusieurs contributions :

- Les échanges thermiques par conduction, $div(\vec{q})$;
- $\rho C_p S_t$ est le terme source décomposé comme la somme de :
  - La dissipation intrinsèque, Δ ;
  - Le terme source volumique externe de chaleur, r ;
  - Le couplage thermoélastique, $S_{CTE} = \rho T \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \underline{\underline{\varepsilon_e}} \partial T} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}_e}}$;
  - Les couplages thermomécaniques avec les autres variables internes, $\sum_k \rho T \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \underline{\underline{V_k}} \partial T} : \underline{\underline{\dot{V}_k}}$.

Certaines hypothèses sont posées afin de tenir compte des particularités des mesures d'auto-échauffement sous sollicitations cycliques. L'élévation de température est définie par $\theta = T - T_0$ où T_0 désigne la température de référence du système. Il est à noter que les élévations de température θ restent faibles par rapport à la température de référence du système T_0. Le matériau demeure macroscopiquement élastique durant l'essai et le processus peut être considéré comme quasi-statique. Dans ce cadre, les hypothèses suivantes sont retenues (Boulanger, 2004; Chrysochoos & Louche, 2000) :

1. ρ et C_p sont considérés indépendants de la température sur la gamme de variation étudiée,
2. La convection interne est négligeable : $\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{dT}{dt}$,
3. Le terme source volumique externe de chaleur est constant au cours du temps,
4. Les termes de couplage thermomécaniques sont négligeables devant le couplage thermoélastique.

1.2.3.2. Méthode d'analyse « 0D »

Dans le but de résoudre l'équation de la chaleur, une modélisation de type 0D ou approche moyenne (Munier, 2012) peut être retenue. L'intégration de l'équation (1) sur le volume (par exemple d'une éprouvette cylindrique de longueur l_{ep} et de rayon r_{ep}) donne

$$\frac{1}{V}\int_{\Omega_V}\rho C_p\dot{\theta}dV+\frac{1}{V}\int_{\Omega_V}div(\vec{q})dV=\frac{1}{V}\int_{\Omega_V}\rho C_p S_t dV. \quad (2)$$

Deux types de pertes thermiques rentrent en jeu dans le cas d'une éprouvette sur une machine de traction. Les échanges avec le milieu ambiant sur les faces latérales et ceux au niveau du contact entre les têtes de l'éprouvette et les mors de la machine. Grâce au théorème de la divergence, ces pertes peuvent s'écrire

$$\frac{1}{V}\int_{\Omega_V}div(\vec{q})dV=\frac{1}{V}\oint_{\Omega_S}q.ndS, \quad (3)$$

avec n la normale unitaire sortante de la surface, Ω_V le volume et Ω_S la frontière du volume. Les conditions aux limites du problème sont modélisées par des conditions de Fourier, avec h_1 le coefficient d'échange avec l'air et h_2 celui avec les mors. Les échanges par flux avec l'extérieur sont donnés par chacune des faces du volume par

$$\begin{cases}\vec{q}.\vec{n}=h_1\theta^{0D}, pour\ \vec{n}=\vec{e}_r\\ \vec{q}.\vec{n}=h_2\theta^{0D}, pour\ \vec{n}=-\vec{e}_z\ et\ \vec{n}=\vec{e}_z\end{cases}, \quad (4)$$

avec $(\vec{e}_r,\vec{e}_\phi,\vec{e}_z)$ le repère cylindrique. La grandeur θ^{0D} représente l'élévation de température moyenne dans le volume. L'équation (3) s'écrit donc

$$\frac{1}{V}\oint_{\Omega_S}q.ndS=\frac{1}{V}\left[h_1\theta^{0D}\left(2\pi r_{ep}l_{ep}\right)+2h_2\theta^{0D}\left(\pi r_{ep}^2\right)\right]=\left(\frac{2h_1}{r_{ep}}+\frac{2h_2}{l_{ep}}\right)\theta^{0D} \quad (5)$$

En posant

$$\left(\frac{2h_1}{r_{ep}}+\frac{2h_2}{l_{ep}}\right)=\frac{\rho C_p}{\tau_{eq}}, \quad (6)$$

où τ_{eq} représente alors le temps caractéristique des pertes thermiques, l'équation de la chaleur (équation (2)) peut être réécrite sous la forme

$$\dot{\theta}^{0D}+\frac{\theta^{0D}}{\tau_{eq}}=S_t^{0D}, \quad (7)$$

où la valeur moyenne du terme source dans le volume avec une approche 0D, en prenant en compte les hypothèses associées, est notée par S_t^{0D}.

Comme dans le cadre considéré, il est possible de montrer que la moyenne du couplage thermo-élastique S_{CTE} est nulle sur un cycle (Boulanger et al., 2004). Ce terme

source moyenné sur un cycle peut donc être relié à la valeur moyenne de la dissipation intrinsèque cyclique du matériau, ou aussi appelé énergie dissipée cyclique, $\widetilde{D}$, par

$$\widetilde{D} = \frac{\rho C_p S_t^{0D}}{f_r}, \tag{8}$$

où f_r est la fréquence du chargement. L'équation de la chaleur, dans le cadre des essais d'AE (approche « 0D »), peut donc se réduire à

$$\dot{\theta}^{0D} + \frac{\theta^{0D}}{\tau_{eq}} = \widetilde{D}\frac{f_r}{\rho C_p}, \tag{9}$$

dont la solution correspond à une évolution exponentielle saturante en régime sollicité (Figure 5(b))

$$\theta^{0D}(t) = \widetilde{D}\frac{f_r \tau_{eq}}{\rho C_p}\left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_{eq}}}\right), \tag{10}$$

et comme une exponentielle décroissante lors du retour à l'équilibre thermique (Figure 5(b))

$$\theta^{0D}(t) = \widetilde{D}\frac{f_r \tau_{eq}}{\rho C_p} e^{-\frac{t}{\tau_{eq}}}, \tag{11}$$

si le régime stabilisé est atteint. Une méthode pour estimer $\widetilde{D}$ consiste donc à mesurer l'élévation de température stabilisée $\overline{\theta}^{0D}$ après plusieurs τ_{eq} de sollicitation et à déterminer τ_{eq} lors de la phase de retour à l'équilibre thermique. Cette approche, appelée en « élévation de température stabilisée », permet d'estimer $\widetilde{D}$ à l'aide de la relation suivante

$$\widetilde{D} = \overline{\theta}^{0D}\frac{\rho C_p}{f_r \tau_{eq}}. \tag{12}$$

1.2.3.3. Présentation de quelques résultats

La Figure 6 montre les courbes d'auto-échauffement obtenues pour trois alliages métalliques différents (acier 300M, acier ML340 et superalliage monocristallin à base de nickel). La présence de deux régimes peut être souvent observé comme c'est le cas ici pour l'acier 300M et l'acier ML340. Néanmoins pour certains matériaux, un seul régime est constaté comme c'est le cas ici pour le superalliage monocristallin à base de nickel.

Lors de la présence de deux régimes un protocole de dépouillement permettant d'estimer la limite d'endurance conventionnelle a pu être établi et perfectionné au fil des années, notamment au sein de l'IRDL (Lepitre, 2024). Ce dernier va être décrit dans la partie suivante.

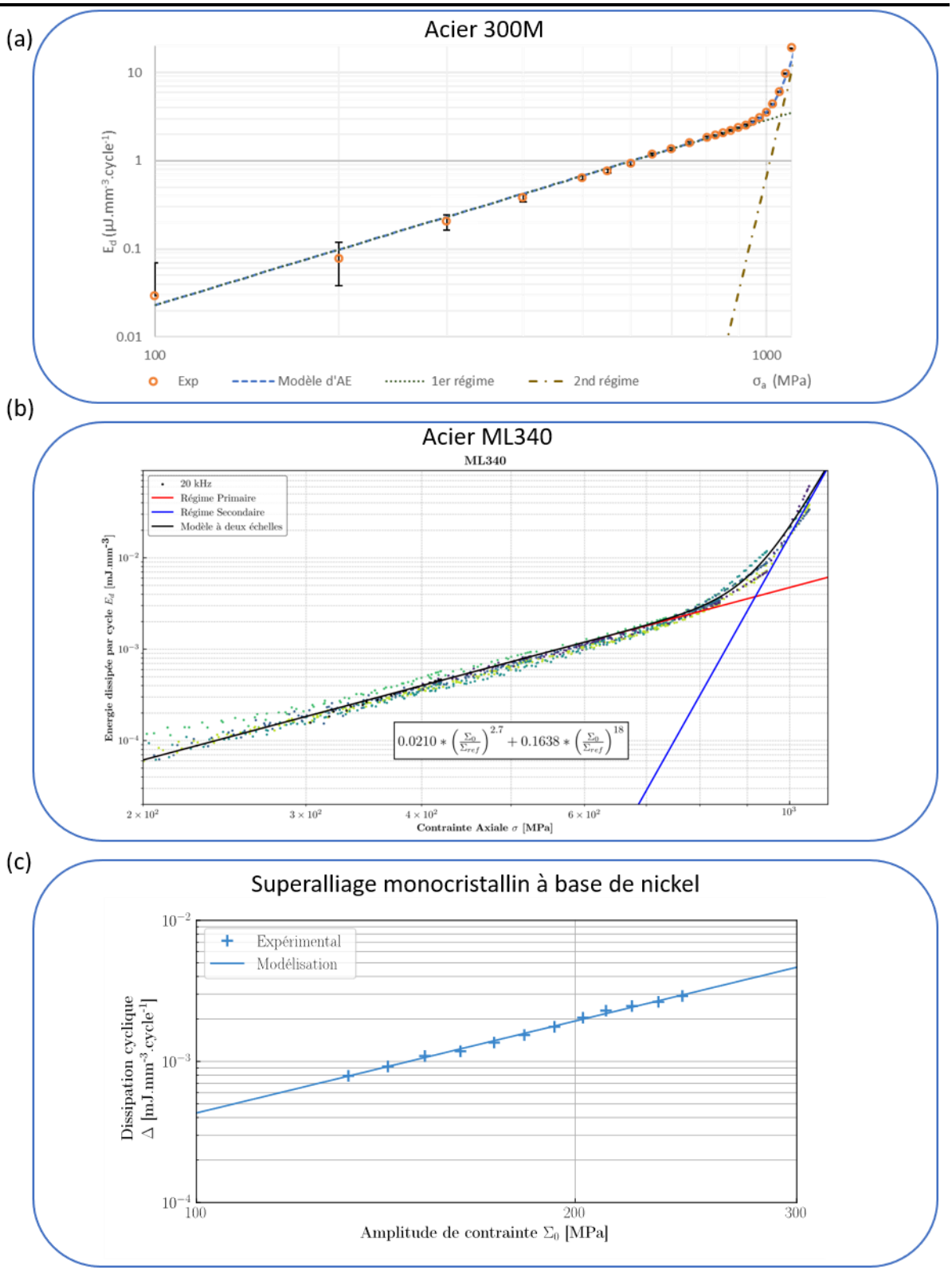


Figure 6. Courbes d'auto-échauffement pour plusieurs alliages métalliques (a) Acier 300M (Lepitre, 2024) (b) acier ML340 (Sévédé, 2025) et (c) superalliage monocristallin à base de Ni (Mion et al., 2025)

1.2.4. Estimation de la limite d'endurance à partir de la courbe d'auto-échauffement

La démarche utilisée pour estimer la limite d'endurance $\overline{\Sigma}_\infty$ à partir de la courbe d'auto-échauffement du matériau est décrite ci-après. Celle-ci repose sur la description de la courbe d'auto-échauffement par une fonction analytique, décrivant les deux régimes d'auto-échauffement, définie par

$$\widetilde{D}(\Sigma_0) = \alpha\left(\frac{\Sigma_0}{\Sigma_{0,max}}\right)^p + \beta\left(\frac{\Sigma_0}{\Sigma_{0,max}}\right)^{m+2} \quad (13)$$

où α et β représentent les intensités du première et du second régime, tandis que p et $(m+2)$ en sont les pentes dans un diagramme log–log (Figure 8). La valeur $\Sigma_{0,max}$ correspond à l'amplitude maximale du dernier palier de chargement. Les quatre paramètres (α, β, p, m) sont déterminés de manière à minimiser l'écart entre l'équation (13) et la courbe d'auto-échauffement expérimentale, selon les étapes suivantes (Lepitre, 2024) :

1. À partir du diagramme log-log, les points appartenant au premier régime sont sélectionnés ;
2. En utilisant uniquement ces points, les paramètres α et p sont déterminés. En fonction de la précision des mesures et du nombre de points, p doit être fixé à l'entier ou au dixième près (pour les aciers : $p \approx 2$) puis α doit être déterminé à nouveau ;
3. La contribution du premier régime est soustraite de $\widetilde{D}(\Sigma_0)$ à afin d'obtenir celle du second régime. Les paramètres β et m sont alors obtenus par régression sur les points associés au second régime.

Un exemple de l'identification du modèle sur un essai d'auto-échauffement réalisé sur un acier 300M est fourni en Figure 7 et Figure 8 (Lepitre, 2024). La limite d'endurance moyenne à 10^7 cycles estimée correspond alors à l'amplitude de chargement Σ_0 du premier point qui s'éloigne d'une valeur supérieure à $\varepsilon_{\widetilde{D}}$ de la dissipation du premier régime, donnée par la relation

$$\overline{\Sigma}_\infty = \min_{\Sigma_{0,i}}\left(\widetilde{D}(\Sigma_{0,i}) - \alpha\left(\frac{\Sigma_0}{\Sigma_{0,max}}\right)^p\right) \geq \varepsilon_{\widetilde{D}}. \quad (14)$$

Le seuil, $\varepsilon_{\widetilde{D}}$, provient de l'incertitude associée à la mesure de l'élévation de température. En considérant une erreur de $\pm\varepsilon_\theta\ mK$ sur la température, l'erreur $\varepsilon_{\widetilde{D}}$ sur l'énergie dissipée est déterminée à partir de l'équation (12). À titre indicatif, l'incertitude de mesure sur l'élévation de température avec le protocole proposé ci-dessus peut être majorée dans la plupart des cas par $\pm 20\ mK$ et par $\pm 1\ s$ sur le τ_{eq}, ce qui conduit à une erreur sur l'énergie dissipée de $\varepsilon_{\widetilde{D}} = \pm 30\ nJ.mm^3.cycle^{-1}$. Le second régime ainsi que le seuil sont représentés en Figure 9.

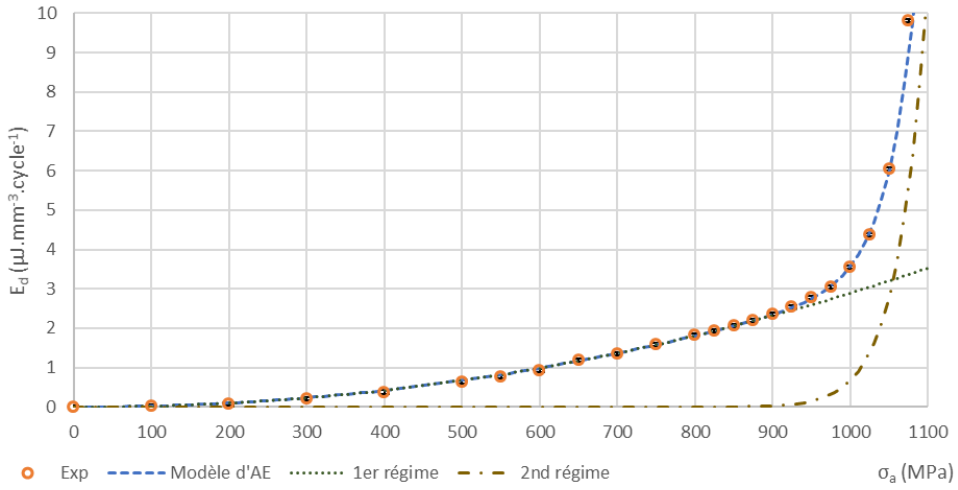


Figure 7. Résultat de l'identification du modèle probabiliste à deux échelles de l'IRDL à partir des résultats d'un essai d'auto-échauffement sous sollicitation cyclique sur l'acier 300M à R = -1 (représentation dans un diagramme linéaire) (Lepitre, 2024)

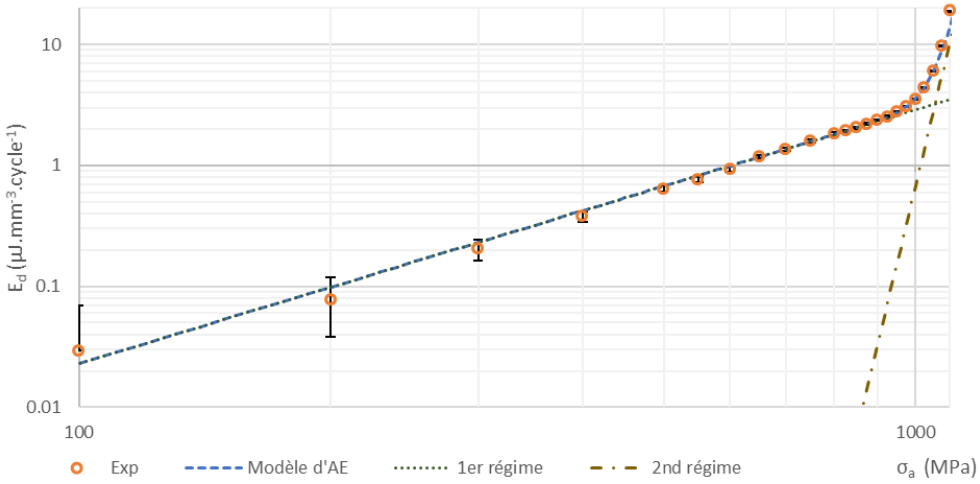


Figure 8. Résultat de l'identification du modèle probabiliste à deux échelles de l'IRDL à partir des résultats d'un essai d'auto-échauffement sous sollicitation cyclique sur l'acier 300M à R = -1 (représentation dans un diagramme log-log) (Lepitre, 2024)

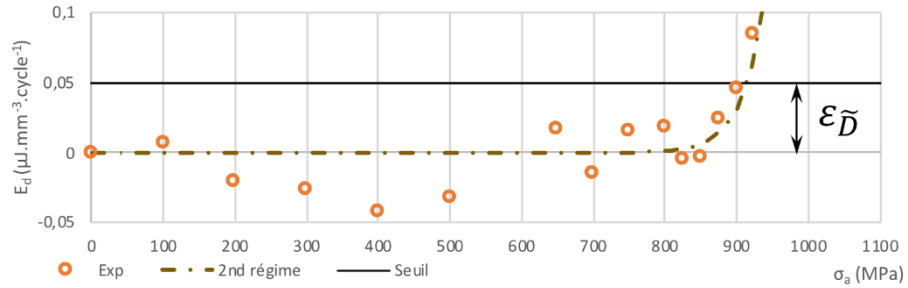


Figure 9. Détermination de la limite d'endurance, $\overline{\Sigma}_\infty$, à partir de l'évolution du second régime d'auto-échauffement sous sollicitation cyclique. Application à l'acier 300M à R = -1. (Lepitre, 2024)

La limite ainsi estimée pour l'acier 300M est en accord avec les résultats d'une campagne d'essais de fatigue classiques (essais « staircase »), plus précisément elle est dans l'intervalle de confiance de la limite d'endurance moyenne obtenu (Lepitre, 2024).

Si ce résultat met en évidence l'intérêt pratique de cette approche, il soulève également des interrogations, en particulier sur les mécanismes sous-jacents aux deux régimes identifiés. La section suivante se concentrera sur la fourniture d'éléments de réponse.

1.2.5. Observations expérimentales des mécanismes à l'origine de l'AE

Pour bien saisir l'évolution de la dissipation intrinsèque moyenne par cycle en fonction de l'amplitude du chargement, il est essentiel d'approfondir la compréhension des mécanismes en jeu au sein du matériau durant les deux régimes de la courbe d'auto-échauffement. Les travaux de Munier et Amini (Amini, 2021; Munier et al., 2017) ont mis en évidence l'identification qualitative de deux régimes distincts : un régime primaire (faibles amplitudes) et un régime secondaire (fortes amplitudes) pour les aciers HSLA et aciers inox 304L respectivement.

Dans le régime primaire, les observations par microscopie optique et diffraction d'électrons rétrodiffusés (EBSD), après application d'un grand nombre de cycles, ont révélé une désorientation intra-granulaire dans la majorité des grains. Celle-ci est liée à la microplasticité, résultant du mouvement et de l'accommodation des dislocations (Figure 10 (a) et Figure 11 (a-b)). Ce processus thermodynamique irréversible entraîne une dissipation d'énergie sous forme de chaleur. C'est l'une des raisons avancées par Munier et par Amini pour expliquer l'élévation de température observée dans cette plage d'amplitude. Toutefois, ce phénomène apparaît de manière diffuse et pour des niveaux de chargement bien inférieurs à la limite d'endurance moyenne. L'hypothèse retenue est donc qu'il n'a pas d'incidence directe sur la tenue à la fatigue à grand nombre de cycles.

Dans le régime secondaire, à la surface de l'éprouvette des bandes de glissement persistantes (BGPs) apparaissent progressivement sous chargement cyclique, à mesure que l'amplitude augmente. Ces BGPs se forment à la suite du mouvement des dislocations et des lacunes sur la surface libre du matériau en forme d'intrusions et extrusions (Polák, 2023). Elles se manifestent sous forme de taches sombres lorsque la surface est observée au microscope optique après sollicitation cyclique (Figure 10 (b-c) et Figure 11 (c-e)). Elles entraînent également une évolution du relief de surface ainsi que des modifications microstructurales (Mughrabi, 2009; Polák, 2023).

Parallèlement, les dislocations s'agglomèrent dans les parois des BGP, car ces dernières sont plus « souples » que la matrice environnante et constituent ainsi des zones de localisation de la déformation (Sangid, 2013). Une fois activées, une augmentation de la densité de dislocations est observée, ce qui conduit à l'écrouissage de la BGP. À mesure que le nombre de cycles augmente, l'écrouissage et la densité de dislocations tendent toutefois à se stabiliser (Grosskreutz, 1971; Sangid, 2013).

Les BGPs constituent donc des zones marquées de localisation de la déformation plastique, du glissement et de l'accumulation de dislocations. L'interface entre la BGP et la matrice forme ainsi un plan de discontinuité caractérisé par des gradients de déformation

abrupts, ce qui en fait un site privilégié pour l'amorçage des fissures (Ma & Laird, 1989; Neumann, 1987; Sangid, 2013). Ainsi, contrairement au régime primaire, les BGPs jouent un rôle majeur dans l'endommagement en fatigue à grand nombre de cycles, et permettent d'établir un lien indirect entre les mesures d'auto-échauffement (régime secondaire) et la durée de vie en fatigue (Amini, 2021; Munier et al., 2017).

Fort de ce constat, ces mêmes auteurs ont cherché à mieux caractériser les facteurs influençant l'apparition des BGP. Tout d'abord cette apparition, aléatoirement réparties sur la surface de l'éprouvette, dépend de l'amplitude du chargement : plus celle-ci est grande plus les BGP sont nombreuses (Figure 12). Elle a été interprétée par plusieurs auteurs (Doudard, 2004; Munier et al., 2017) comme suivant une loi puissance.

De plus, des observations réalisées par EBSD par Amini (Figure 13)(Amini, 2021) et Munier (Munier, 2012) ont montré que l'augmentation de l'amplitude de contrainte ou du nombre de cycles lors des chargements cycliques n'a pas d'influence notable sur le facteur de Schmid, et que les orientations cristallographiques restent inchangées. Ces observations confirment également l'absence d'orientation préférentielle pour l'émergence des BGP. En effet, dans le cas d'un acier où ces phénomènes gouvernent l'apparition de la microplasticité, le plan de cisaillement maximal ne suffit pas à expliquer, à lui seul, la formation des BGP (Munier, 2012). Ces éléments montrent ainsi que d'autres facteurs que l'orientation cristalline pilotent l'apparition de la microplasticité au sein des grains. Parmi ces facteurs figurent l'influence du voisinage cristallographique, responsable de concentrations locales de contraintes, ainsi que la taille des grains et la présence de contraintes résiduelles. Une conclusion similaire a été rapportée pour les aciers dual-phase : Gironès et al. (Gironès et al., 2004) ont notamment montré que l'apparition de microplasticité dans la ferrite est fortement influencée par le voisinage des grains.

Par ailleurs, le nombre de BGP ne présente pas de dépendance directe vis-à-vis du nombre de cycles (Amini, 2021 ; Munier et al., 2017). Il convient néanmoins de souligner qu'un nombre de cycles élevé est nécessaire pour que l'activité microplastique intragranulaire conduise effectivement à l'émergence de la BGP. Ainsi, l'absence d'émergence dans une zone donnée pour un nombre de cycles limité peut ne pas traduire une absence d'activité microplastique, mais simplement un nombre de cycles encore insuffisant.

Ces différents éléments permettent de mieux comprendre le lien qui peut être établi entre les mesures d'AE et les propriétés en fatigue. Néanmoins, il restait alors à établir une passerelle robuste basée sur une modélisation appropriée de ces observations, et ainsi mettre en place une approche rationnelle de l'utilisation des mesures d'AE au service de la fatigue. La présentation de ce modèle développé au sein de l'IRDL va être décrit dans la prochaine section.

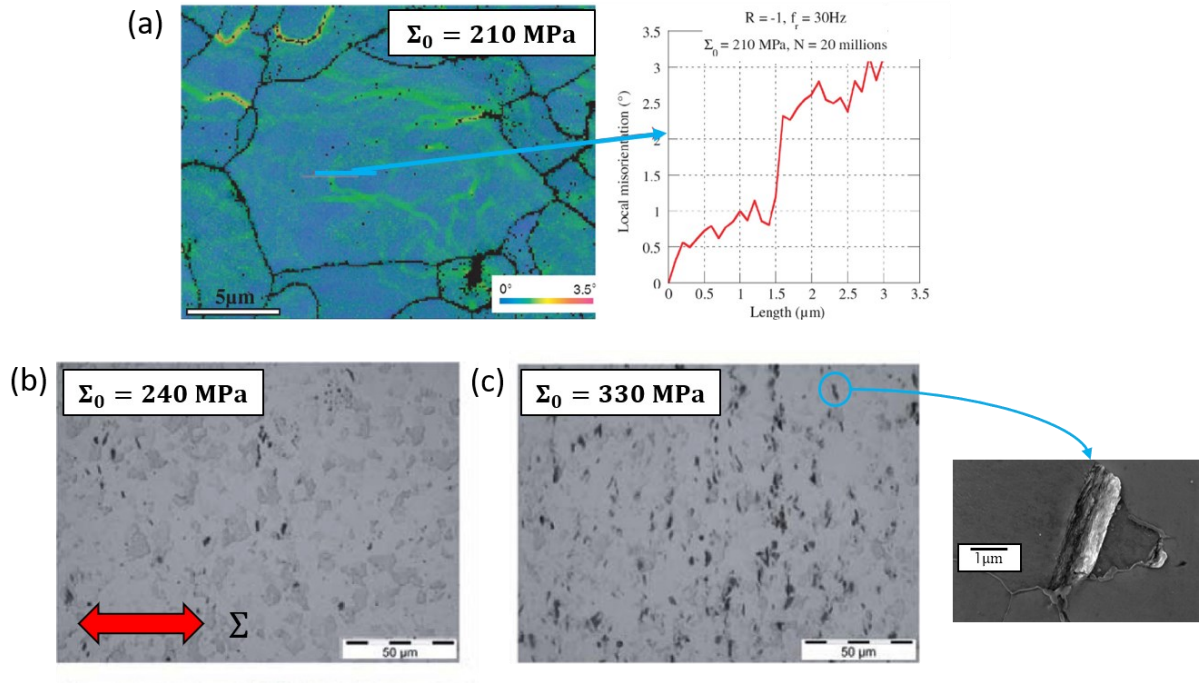


Figure 10. (a) Représentation de la désorientation locale présente pendant le régime primaire après 20 000 cycles et (b-c) Apparition progressive de bandes de glissement persistantes sur la surface à 240 MPa et 330 MPa (adapté de (Munier et al., 2017))

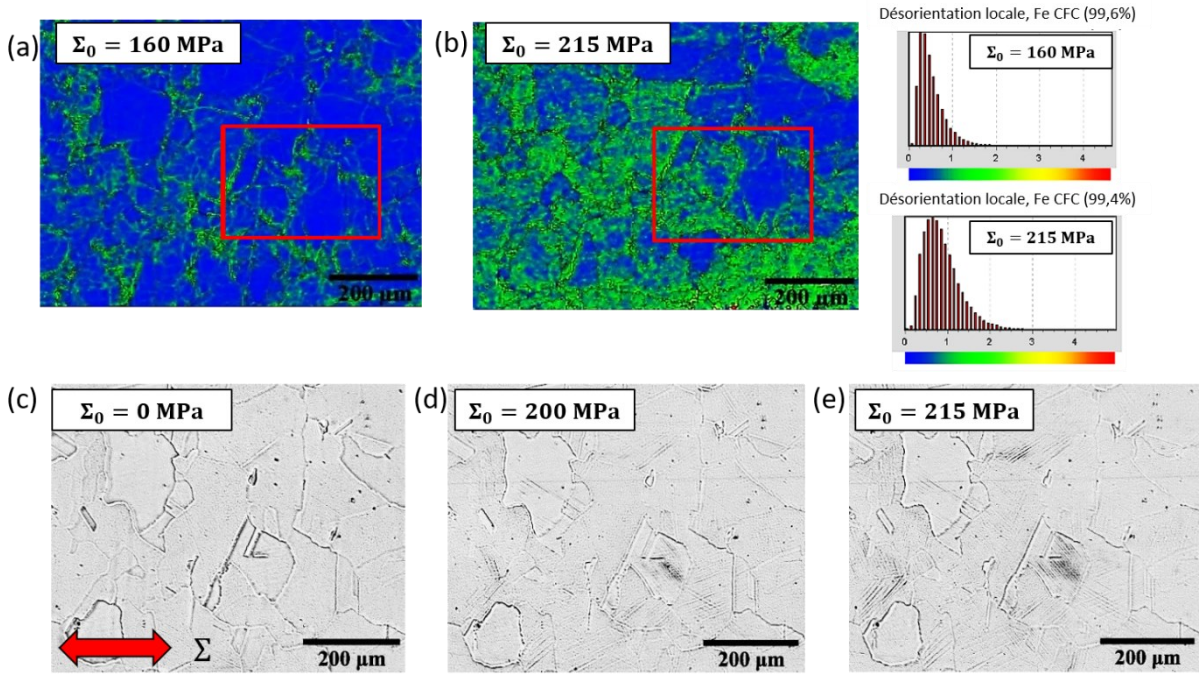


Figure 11. (a) Représentation de la désorientation locale présente à 160 MPa et 215 MPa (a-b). Apparition progressive de bandes de glissement persistantes sur la surface à 0 MPa, 200 MPa et 125 MPa (adapté de (Amini, 2021)).

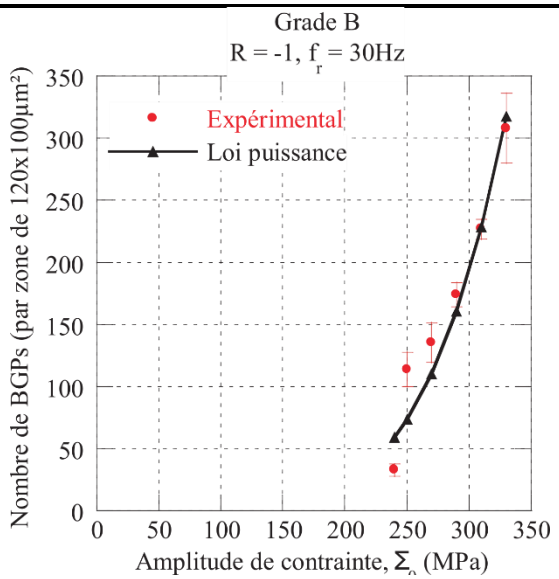


Figure 12. Nombre de BGPs moyen sur la surface en fonction de l'amplitude de chargement pour un acier HSLA420 (Munier, 2012).

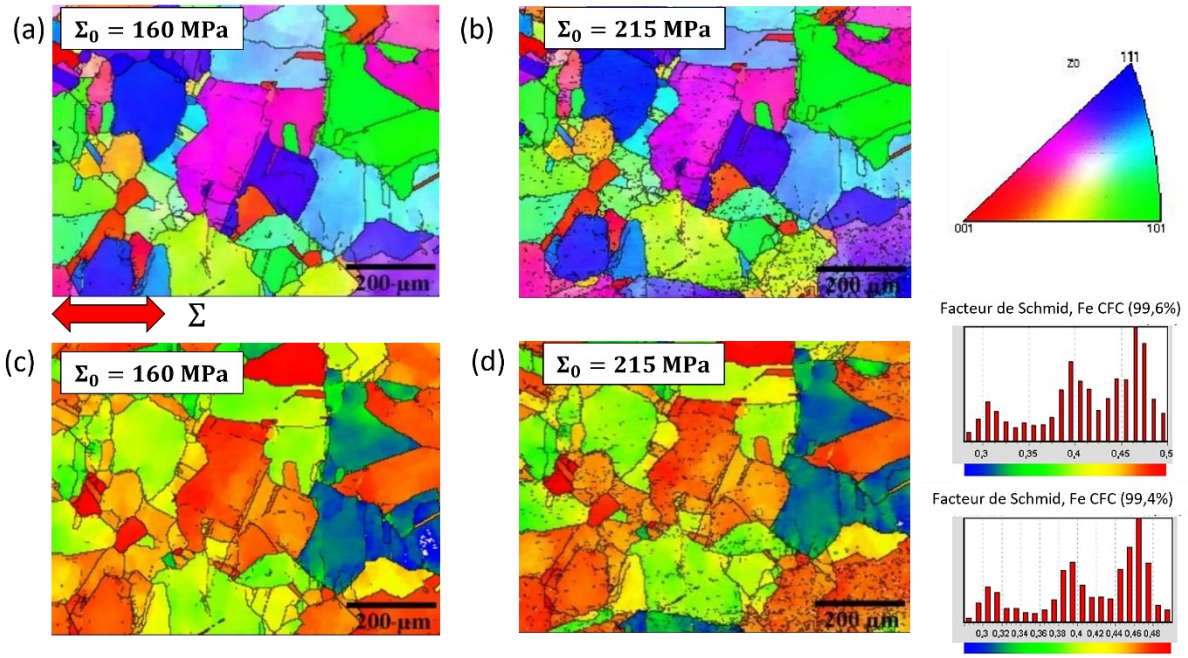


Figure 13. Distribution des orientations cristallographiques (a-b) et distribution du Facteur de Schmid (c-d) (adapté de (Amini, 2021).

1.3. Modèle probabiliste à deux échelles

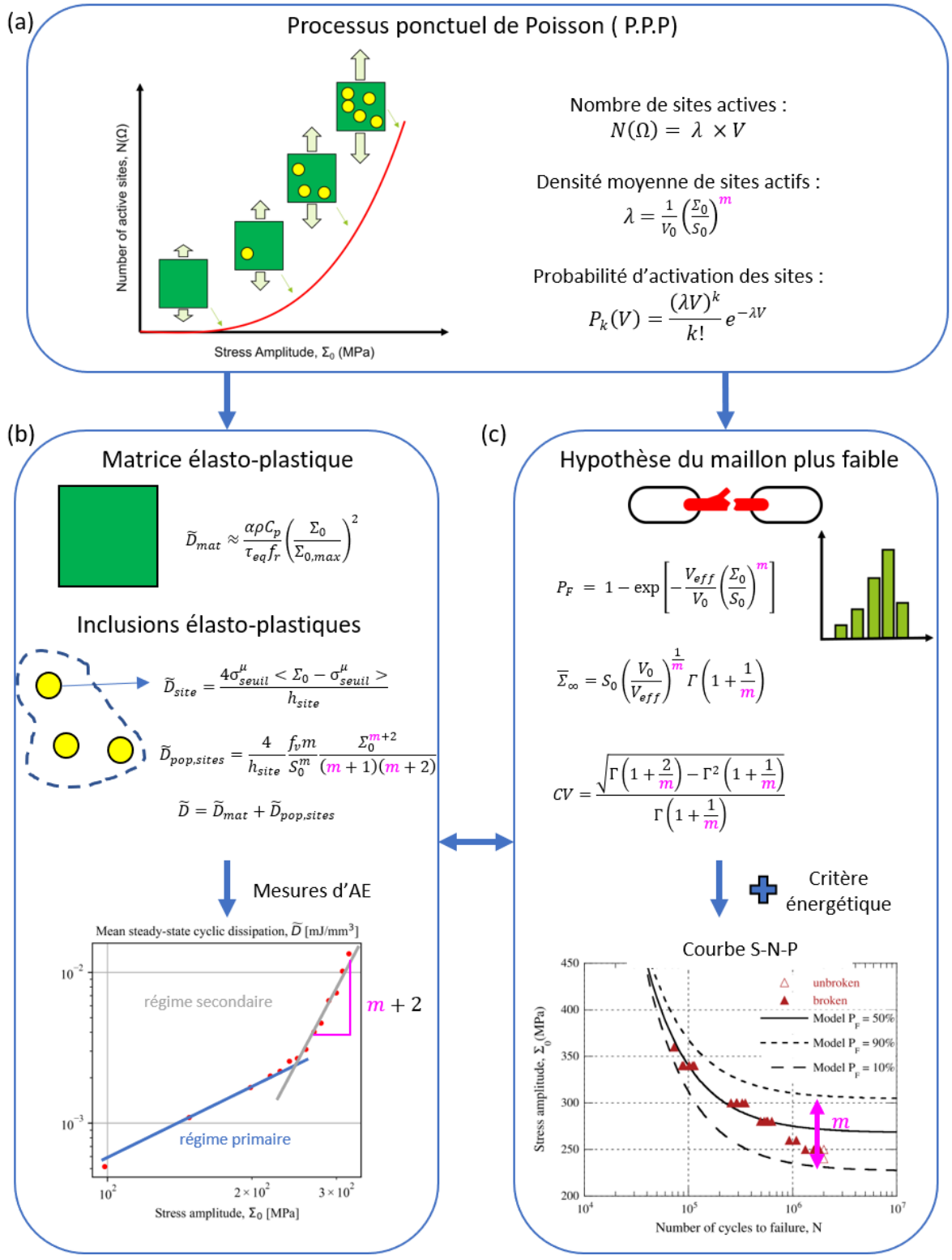


Figure 14. Modèle probabiliste à deux échelles et ses étapes élémentaires

Dans cette section, la description de la courbe d'auto-échauffement par le modèle probabiliste à deux échelles est présentée. Puis, la passerelle vers la prédiction de la tenue à la fatigue est décrite. Ce modèle sera présenté en cinq étapes. La première concerne la

représentation du matériau, à travers la description d'un volume élémentaire représentatif (VER) constitué d'une matrice élasto-plastique contenant une population de sites potentiellement activables (un site activé = un site dont la réponse mécanique diffère de celui de la matrice), représentant les zones susceptibles de dissiper plus fortement à plus forte amplitude (Figure 14(b)). Dans une deuxième étape le comportement mécanique de la matrice est décrit. Il est caractérisé par une loi élasto-plastique conduisant à une évolution de la dissipation en fonction de l'amplitude proche d'une loi quadratique. Ainsi la dissipation associée à la matrice sert à décrire le régime primaire. Dans une troisième étape, la loi de comportement d'un unique site est introduite. Il est modélisé comme celui de la matrice en considérant en plus un second écrouissage dont l'activation dépend d'une limite d'activation propre. La réponse locale d'un site est alors obtenue en considérant une loi de localisation similaire à celle proposée par Eshelby. Puis le comportement dissipatif de l'ensemble des sites est déterminé, en considérant un Processus Ponctuel de Poisson (P.P.P.) (Figure 14(a)) pour décrire la variabilité de l'activation des sites (Denoual & Marquis, 1998; Doudard et al., 2005; Jeulin, 1991). La dissipation de l'ensemble des sites permet alors de décrire le régime secondaire. Dans une cinquième étape, le cadre du P.P.P. couplé à l'hypothèse du maillon faible, permet d'établir une distribution des limites d'endurance décrite par une loi de Weibull (Weibull, 1951) (Figure 14(c)). En considérant un critère énergétique, il est alors possible de décrire les courbes S-N-P.

1.3.1. Représentation du matériau (VER)

Pour représenter le caractère diffus du régime primaire, la matrice du matériau est modélisée par un comportement élasto-plastique. En revanche, la description du régime secondaire, de nature plus localisée comme observée dans la section précédente, est obtenu en considérant une population de sites ponctuels au sein desquels des phénomènes de microplasticité plus intenses peuvent apparaître. Chaque site est considéré comme un point ponctuel possédant un comportement élasto-plastique semblable à la matrice à un écrouissage près et possédant un seuil d'activation qui lui est propre. Un site est qualifié d' « actif » lorsqu'il dissipe différemment de la matrice, c'est-à-dire lorsqu'un mécanisme de microplasticité supplémentaire se manifeste. À l'inverse, si le site présente le même niveau de dissipation que la matrice, il est dit « inactif ».

Ainsi, le volume élémentaire représentatif (VER) est défini comme une matrice élasto-plastique dans laquelle est intégrée une population de sites potentiellement activables (Figure 14(b)). Pour un matériau à l'état initial, non encore sollicité, et soumis à des chargements de faible amplitude, la dissipation est uniquement imputable à la matrice du VER. En revanche, pour des amplitudes de chargement plus élevées, la dissipation résulte de la contribution de la matrice et des sites devenus actifs.

1.3.2. Comportement et dissipation de la matrice

Le choix d'une modélisation pour le comportement élasto-plastique de la matrice est complexe, car il faut parvenir à une dissipation conforme aux mesures d'auto-échauffement tout en ayant des niveaux très faibles de déformation plastique, étant donné que les amplitudes des contraintes examinées restent largement inférieures à la limite d'élasticité macroscopique (c'est-à-dire avoir des boucles d'hystérèse très faiblement ouvertes). De plus, pour les faibles amplitudes de chargement, la dissipation est stable après quelques cycles. Cela a donc conduit Munier (Munier, 2012) a considéré un écrouissage cinématique non linéaire spécifique.

L'énergie libre de la matrice est définie par

$$\rho\psi_{mat}\left(\underline{\underline{\varepsilon}}_{mat}, \underline{\underline{\varepsilon}}_{mat,p}, \underline{\underline{\alpha}}_{mat}\right) = \psi^{el}_{mat}\left(\underline{\underline{\varepsilon}}_{mat}, \underline{\underline{\varepsilon}}_{mat,p}\right) + \psi^{ecr}_{mat}\left(\underline{\underline{\alpha}}_{mat}\right) \tag{15}$$

$$= \frac{1}{2}\left(\underline{\underline{\varepsilon}}_{mat} - \underline{\underline{\varepsilon}}_{mat,p}\right) : \underline{\underline{\underline{\underline{E}}}}\left(\underline{\underline{\varepsilon}}_{mat} - \underline{\underline{\varepsilon}}_{mat,p}\right) + \frac{1}{2}B_1\,\underline{\underline{\alpha}}_{mat} : \underline{\underline{\alpha}}_{mat} \tag{16}$$

avec $\psi^{el}_{mat}\left(\underline{\underline{\varepsilon}}_{mat}, \underline{\underline{\varepsilon}}_{mat,p}\right)$ la contribution élastique (énergie stockée récupérable) et $\psi^{ecr}_{mat}\left(\underline{\underline{\alpha}}_{mat}\right)$ celle de l'écrouissage (énergie stockée non récupérable). Par souci de simplification, la variable d'état, *T*, n'est pas considéré ici, dans la mesure où la contribution du couplage thermoélastique n'est pas étudiée dans notre étude. Les paramètres matériaux du problème sont : $\underline{\underline{\underline{\underline{E}}}}$ le tenseur d'élasticité d'ordre 4, B_1 une constante dépendant du matériau. Les forces thermodynamiques associées sont

$$\begin{cases} \rho\dfrac{\partial\psi_{mat}}{\partial\underline{\underline{\varepsilon}}_{mat}} = \underline{\underline{\underline{\underline{E}}}} : \left(\underline{\underline{\varepsilon}}_{mat} - \underline{\underline{\varepsilon}}_{mat,p}\right) = \underline{\underline{\sigma}}_{mat} \\ \rho\dfrac{\partial\psi_{mat}}{\partial\underline{\underline{\varepsilon}}_{mat,p}} = -\underline{\underline{\underline{\underline{E}}}} : \left(\underline{\underline{\varepsilon}}_{mat} - \underline{\underline{\varepsilon}}_{mat,p}\right) = -\underline{\underline{\sigma}}_{mat} \\ \rho\dfrac{\partial\psi_{mat}}{\partial\underline{\underline{\alpha}}_{mat}} = B_1\underline{\underline{\alpha}}_{mat} = \underline{\underline{X}}_{mat} \end{cases} \tag{17}$$

Le domaine d'élasticité f de la matrice est décrit à partir du critère de von Mises et des forces thermodynamiques associées

$$f\left(\underline{\underline{\sigma}}_{mat}, \underline{\underline{X}}_{mat}\right) = J_2\left(\underline{\underline{\sigma}}_{mat} - \underline{\underline{X}}_{mat}\right) - \Sigma^{y}_{mat} \leq 0 \tag{18}$$

avec Σ^{y}_{mat} la limite d'élasticité de la matrice (très inférieure à la limite macroscopique du matériau dans la mesure où il est nécessaire d'obtenir de la dissipation non nulle même à très faible amplitude), et

$$J_2\left(\underline{\underline{\sigma}}_{mat} - \underline{\underline{X}}_{mat}\right) = \sqrt{\frac{3}{2}\left(\underline{\underline{s}}_{mat} - \underline{\underline{X}}_{mat}\right) : \left(\underline{\underline{s}}_{mat} - \underline{\underline{X}}_{mat}\right)}, \quad (19)$$

où $\underline{\underline{s}}_{mat}$ est le déviateur des contraintes donné par $\underline{\underline{s}}_{mat} = \underline{\underline{\sigma}}_{mat} - \left(\frac{1}{3}\right) Trace\left(\underline{\underline{\sigma}}_{mat}\right) \underline{\underline{1}}$.

Une surface potentielle, F permettant d'obtention de l'évolution des variables internes est considerée. Elle est donnée par

$$F(\underline{\underline{\sigma}}_{mat}, \underline{\underline{X}}_{mat}) = J_2(\underline{\underline{\sigma}}_{mat} - \underline{\underline{X}}_{mat}) - \Sigma_{mat}^{y} + \frac{3}{4}\frac{\gamma_{mat}}{C_{mat}}\left(\underline{\underline{X}}_{mat} : \underline{\underline{X}}_{mat}\right)^{n} \quad (20)$$

Il convient de noter que le cas n=1 conduit au pseudo-potentiel proposé par Armstrong et Frederick (Armstrong et al., 1966). Les lois d'évolution associées sont ensuite déduites de ce pseudo-potentiel, en appliquant les hypothèses de normalité

$$\begin{cases} \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_{mat,p} = \dfrac{\dot{\lambda}\partial F}{\partial \underline{\underline{\sigma}}_{mat}} = \dfrac{\dot{\lambda}\partial f}{\partial \underline{\underline{\sigma}}_{mat}} \\ \underline{\underline{\dot{\alpha}}}_{mat} = -\dfrac{\dot{\lambda}\partial F}{\partial \underline{\underline{X}}_{mat}} \end{cases}. \quad (21)$$

La loi d'évolution de l'écrouissage cinématique devient :

$$\underline{\underline{\dot{X}}}_{mat} = \frac{2}{3} C_{mat}\, \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_{mat,p} - \gamma_{mat} n \dot{\lambda}\left(\underline{\underline{X}}_{mat} : \underline{\underline{X}}_{mat}\right)^{n-1} \underline{\underline{X}}_{mat} \quad (22)$$

avec $\dot{\lambda}$ le multiplicateur plastique. Cette loi dépend de trois paramètres : C_{mat} avec $B_1 = 2/3C_{mat}$, le terme de rappel γ_{mat} et un paramètre n à définir.

Le multiplicateur plastique $\dot{\lambda}$ est obtenu via la condition de cohérence

$$\dot{f} = \frac{\partial f}{\partial \underline{\underline{\sigma}}_{mat}} : \underline{\underline{\dot{\sigma}}}_{mat} + \frac{\partial f}{\partial \underline{\underline{X}}_{mat}} : \underline{\underline{\dot{X}}}_{mat} = 0 \quad (23)$$

On en déduit alors

$$\dot{\lambda} = \frac{H(f)}{h_{mat}} \frac{\partial f}{\partial \underline{\underline{\sigma}}_{mat}} : \underline{\underline{\dot{\sigma}}}_{mat}, \quad (24)$$

avec $H(f) = 0\ si\ f < 0\ et\ H(f) = 1\ si\ f = 0$, et

$$h_{mat} = C_{mat} - \gamma_{mat}\, n \left(\underline{\underline{X}}_{mat} : \underline{\underline{X}}_{mat}\right)^{n-1} \frac{\partial f}{\partial \underline{\underline{\sigma}}_{mat}} : \underline{\underline{X}}_{mat}. \quad (25)$$

La dissipation intrinsèque de la matrice, $\dot{D}_{mat}$ est ensuite déterminée à partir des variables d'état associés et leurs forces thermodynamiques associés

$$\dot{D}_{mat} = \underline{\underline{\sigma}}_{mat} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_{mat,p} - \underline{\underline{X}}_{mat} : \underline{\underline{\dot{\alpha}}}_{mat} \quad (26)$$

En traction-compression uniaxiale, la relation précédente s'écrit

$$\dot{D}_{mat} = \underline{\underline{\Sigma}}^{y}_{mat} \frac{H(f)}{h_{mat}} \left|\underline{\underline{\dot{\sigma}}}_{mat}\right| + \frac{\gamma_{mat}}{C_{mat}} n \left(\frac{2}{3}\right)^{2n} \left(\underline{\underline{\sigma}}_{mat} - \underline{\underline{\Sigma}}^{y}_{mat}\right)^{2n} \frac{H(f)}{h_{mat}} \left|\underline{\underline{\dot{\sigma}}}_{mat}\right| \quad (27)$$

L'énergie volumique dissipée sur un cycle par la matrice, $\widetilde{D}_{mat}$ est calculée en intégrant la dissipation

$$\widetilde{D}_{mat} = \int_{cycle} \dot{D}_{mat}\, dt \quad (28)$$

Expérimentalement, pour une grande partie des aciers, le régime primaire suit une loi puissance d'ordre 2 en fonction de l'amplitude, ce qui revient à $n \approx 0{,}5$ (Lepitre, 2024; Louge et al., 2022; Munier, 2012).

En choisissant judicieusement les paramètres de la loi d'évolution de l'écrouissage cinématique, il est possible de retrouver une dissipation cyclique proche d'une loi quadratique. En introduisant, alors, un paramètre matériau α et $\Sigma_{0,max}$ une contrainte de normalisation, on obtient

$$\widetilde{D}_{mat} \approx \alpha \left(\frac{\Sigma_0}{\Sigma_{0,max}}\right)^2 \quad (29)$$

1.3.3. Comportement et dissipation d'un site

1.3.3.1. Loi de comportement d'un site (inclusion)

Pour l'étude de la loi de comportement d'un site, quelques hypothèses sont considérées. Un site étant par définition noyé dans la matrice, une loi de localisation est requise pour relier l'état de contrainte dans le site à l'état de contrainte appliqué au VER, $\underline{\underline{\Sigma}}$,

$$\underline{\underline{\sigma}}_{site} = \underline{\underline{\Sigma}} - 2\mu(1-\beta)\left(\underline{\underline{\varepsilon}}_{site,p} - \underline{\underline{E}}_p\right). \quad (30)$$

avec β un paramètre tel que $\beta = \frac{2(4-5\nu)}{15(1-\nu)}$ où μ et ν étant respectivement le module de cisaillement et le coefficient de Poisson du matériau, et qui se déduit de l'analyse d'Esheby (Eshelby, 1957) (Franciosi et al., 1979), et, $\underline{\underline{E}}_p$ les déformations plastiques du VER, approximées par celles de la matrice. Ensuite, il convient de définir l'énergie libre de ce dernier en y intégrant un second écrouissage possédant un seuil d'activation afin que puisse se développer au sein du site des déformations plastiques plus importantes.

L'énergie libre du site est donc définie comme la somme de la contribution élastique $\psi^{el}_{site}\left(\underline{\underline{\varepsilon}}_{site}, \underline{\underline{\varepsilon}}_{site,p}\right)$, de la contribution associée à l'écrouissage identique à celui de la matrice

$\rho\psi_{site}^{ecr,mat}\left(\underline{\underline{\alpha}}_{1,site}\right)$ ainsi que de la contribution associée au second écrouissage propre au site, $\rho\psi_{site}^{ecr,site}\left(\underline{\underline{\alpha}}_{2,site}\right)$ telle que

$$\rho\psi_{site}\left(\underline{\underline{\varepsilon}}_{site},\underline{\underline{\varepsilon}}_{site,p},\underline{\underline{\alpha}}_{1,site},\underline{\underline{\alpha}}_{2,site}\right)=$$
$$=\frac{1}{2}\left(\underline{\underline{\varepsilon}}_{site}-\underline{\underline{\varepsilon}}_{site,p}\right):\underline{\underline{\underline{\underline{E}}}}::\left(\underline{\underline{\varepsilon}}_{site}-\underline{\underline{\varepsilon}}_{site,p}\right)+\frac{1}{2}B_1\underline{\underline{\alpha}}_{1,site}:\underline{\underline{\alpha}}_{1,site}+\frac{1}{2}B_2\underline{\underline{\alpha}}_{2,site}:\underline{\underline{\alpha}}_{2,site} \quad (31)$$

où les variables d'état sont :

- $\underline{\underline{\varepsilon}}_{site}$, tenseur déformations totales du site ;
- $\underline{\underline{\varepsilon}}_{site,p}$, tenseur déformation plastique du site ;
- $\underline{\underline{\alpha}}_{1,site}$, la variable associée à l'écrouissage identique à celui de la matrice ;
- $\underline{\underline{\alpha}}_{2,site}$, la variable associée au second écrouissage cinématique choisi linéaire.

Les forces thermodynamiques associées sont calculées en dérivant l'énergie libre du site par chacune de ses variables d'état comme

$$\begin{cases}\rho\dfrac{\partial\psi_{site}}{\partial\underline{\underline{\varepsilon}}_{site}}=\underline{\underline{\underline{\underline{E}}}}:\left(\underline{\underline{\varepsilon}}_{site}-\underline{\underline{\varepsilon}}_{site,p}\right)=\underline{\underline{\sigma}}_{site}\\ \rho\dfrac{\partial\psi_{site}}{\partial\underline{\underline{\varepsilon}}_{site,p}}=-\underline{\underline{\underline{\underline{E}}}}:\left(\underline{\underline{\varepsilon}}_{site}-\underline{\underline{\varepsilon}}_{site,p}\right)=-\underline{\underline{\sigma}}_{site}\\ \rho\dfrac{\partial\psi_{site}}{\partial\underline{\underline{\alpha}}_{1,site}}=B_1\underline{\underline{\alpha}}_{site}=\underline{\underline{X}}_{1,site}\\ \rho\dfrac{\partial\psi_{site}}{\partial\underline{\underline{\alpha}}_{2,site}}=B_2\underline{\underline{\alpha}}_{site}=\underline{\underline{X}}_{2,site}\end{cases} \quad (32)$$

La loi d'évolution du second écrouissage $\underline{\underline{X}}_{2,site}$, qui est linéaire, est donnée par, avec $B_2=2/3C_{site}$,

$$\dot{\underline{\underline{X}}}_{2,site}=\frac{2}{3}C_{site}\,\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{site,p} \quad (33)$$

Le comportement d'un site dépend de son état, à savoir soit il n'est pas activé, soit il est actif. Tant qu'il reste inactif, c'est-à-dire sans activation du second écrouissage, il se comporte comme la matrice et suit le comportement défini précédemment. En revanche, dès qu'il est activé, à savoir dès que $J_2\left(\underline{\underline{\sigma}}_{site}\right)=\sigma_{seuil}^{\mu}$, son comportement est régi par le second écrouissage. Une fois activé, le site conserve définitivement ce régime, puisque l'activation traduit l'apparition d'un mécanisme de microplasticité irréversible, distinct de celui de la matrice. De plus, étant donné la nature du second écrouissage, celui-ci prend le dessus sur le premier de sorte que le premier peut ne plus être considéré en prenant soin de modifier le seuil comme il se doit. Ainsi, le domaine d'élasticité s'écrit alors

$$\begin{cases} f_{site} = J_2\left(\underline{\underline{\sigma}}_{site} - \underline{\underline{X}}_1\right) - \Sigma_{mat}^{y} \leq 0 \; si \; site \; non \; activé \\ f_{site}\left(\underline{\underline{\sigma}}_{site}, \underline{\underline{X}}_{2,site}\right) = J_2\left(\underline{\underline{\sigma}}_{site} - \underline{\underline{X}}_{2,site}\right) - \sigma_{seuil}^{\mu} \leq 0 \; sinon \end{cases} \quad (34)$$

1.3.3.2. Dissipation cyclique d'un site

La dissipation intrinsèque du site dépend aussi de son état d'activation. Si le site est inactif, alors il dissipe autant que la matrice (écrouissage $\underline{\underline{X}}_{1,site}$ considéré), mais dès qu'il s'active, alors sa dissipation est due principalement au second écrouissage, $\underline{\underline{X}}_{2,site}$. Ainsi la dissipation intrinsèque d'un site activé s'écrit

$$\dot{D}_{site} \approx (\underline{\underline{\sigma}}_{site} - \underline{\underline{X}}_{2,site}) : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}_{site}^{p}}} \quad (35)$$

Le multiplicateur plastique, $\dot{\lambda}_{site}$, est défini pour le cas d'un chargement de traction-compression à partir de la condition de cohérence comme suit

$$\dot{\lambda}_{site} = \frac{H(f_{site})}{h_{site}} \frac{\partial f_{site}}{\partial \underline{\underline{\sigma}}_{site}} : \underline{\underline{\dot{\Sigma}}} = \frac{H(f_{site})}{h_{site}} \frac{\partial f_{site}}{\partial \underline{\underline{\sigma}}_{site}} : |\dot{\Sigma}| \quad (36)$$

où $h_{site} = C_{site} + 3\mu(1-\beta)$ et $H(f_{site})$, la fonction d'Heaviside. L'énergie dissipé sur un cycle par un site activé, $\widetilde{D}_{site}$, est alors calculée en intégrant la dissipation intrinsèque du site sur un cycle

$$\widetilde{D}_{site} = \int_{cycle} \dot{D}_{site}\, dt = \int_{cycle} \sigma_{seuil}^{\mu} \dot{\lambda}_{site}\, dt \quad (37)$$

Si on considère un chargement de traction-compression d'amplitude Σ_0, L'énergie dissipée sur un cycle est donnée par (Doudard, 2004; Munier, 2012)

$$\widetilde{D}_{site} = \frac{4\sigma_{seuil}^{\mu} < \Sigma_0 - \sigma_{seuil}^{\mu} >}{h_{site}}, \quad (38)$$

où l'opérateur $<.>$ représente la partie positive, et pour un site dont le seuil d'activation est σ_{seuil}^{μ}.

1.3.4. Calcul de la dissipation cyclique totale

Comme dans le VER, une population de sites est considérée, il convient désormais de calculer la dissipation associée à l'ensemble de cette population, $\widetilde{D}_{pop,sites}$. La dissipation du VER sera alors donnée par

$$\widetilde{D} = \widetilde{D}_{mat} + \widetilde{D}_{pop,sites} \quad (39)$$

Afin de modéliser l'activation des sites, il est considéré que les sites sont repartis de façon aléatoire au sein du VER et que leur activation est décrite à l'aide d'un Processus Ponctuel de Poisson (P.P.P) (Denoual & Marquis, 1998; Doudard et al., 2005; Jeulin, 1991). Les observations expérimentales des bandes de glissement dans certains aciers ont montré qu'une loi de puissance est pertinente pour décrire l'apparition de ces sites (Doudard et al., 2005)(Cugy & Galtier, 2002; Doudard et al., 2005; Munier et al., 2014) en fonction de l'amplitude du chargement.

Avec un tel processus, le nombre de sites actifs dans un domaine Ω d'un volume *V* est donnée par $N(\Omega) = \lambda V$, avec λ la densité du processus qui est modélisé comme une loi de puissance de la contrainte, comme proposé par (Doudard et al., 2005)

$$\lambda(\Sigma_0) = \frac{1}{V_0}\left(\frac{\Sigma_0}{S_0}\right)^m, \quad (40)$$

où m , $V_0 S_0^m$ sont des paramètres matériaux. Le nombre de sites pourra être exprimé comme

$$N(\Omega) = \frac{V}{V_0}\left(\frac{\Sigma_0}{S_0}\right)^m, \quad (41)$$

Dans cette relation m et S_0 représentent respectivement le module et le paramètre d'échelle de la loi de Weibull (Weibull, 1951) et V_0 est un second paramètre d'échelle (homogène à un volume). Ainsi plus l'amplitude de chargement est grande, plus le nombre de sites actifs est important, ce qui revient à dire que le seuil d'activation σ^{μ}_{seuil} est différent d'un site à l'autre. Comme le nom du processus l'indique par définition un site n'a pas de volume (c'est juste un point), mais afin d'avoir une dissipation non nulle, un volume lui est associé. Il est supposé qu'il est identique pour tous les sites. Avec cette formulation, la densité de dissipation moyenne pour les inclusions peut être calculé comme suit

$$\widetilde{D}_{pop,sites} = \frac{1}{V}\int_0 \widetilde{D}_{site}(\sigma^{\mu}_{seuil}) V_{site} dN(\sigma^{\mu}_{seuil}), \quad (42)$$

avec V_{site} le volume d'un site et $dN(\sigma^{\mu}_{seuil})$ le nombre de sites activés entre une contrainte Σ et $\Sigma + d\Sigma$ donnée par

$$dN(\sigma^{\mu}_{seuil}) = \frac{V}{V_0}\frac{m}{S_0^m}(\sigma^{\mu}_{seuil})^{m-1} d\sigma^{\mu}_{seuil}. \quad (43)$$

En intégrant la dissipation d'un site dans l'équation précédente, on obtient :

$$\widetilde{D}_{pop,sites} = \frac{V_{site}}{V}\int_0^{\infty} \frac{4\sigma^{\mu}_{seuil} < \Sigma_0 - \sigma^{\mu}_{seuil} >}{h_{site}} dN(\sigma^{\mu}_{seuil}), \quad (44)$$

ce qui donne

$$\widetilde{D}_{pop,sites} = \frac{4}{h_{site}} \frac{m}{S_0^m} \frac{V_{site}}{V_0} \frac{\Sigma_0^{m+2}}{(m+1)(m+2)}. \quad (45)$$

La dissipation volumique cyclique est donc donnée par

$$\widetilde{D} = \alpha \left(\frac{\Sigma_0}{\Sigma_{0,max}} \right)^2 + \frac{4}{h_{site}} \frac{m}{S_0^m} \frac{V_{site}}{V_0} \frac{\Sigma_0^{m+2}}{(m+1)(m+2)}, \quad (46)$$

qui s'écrit aussi sous la forme suivante

$$\widetilde{D} = \alpha \left(\frac{\Sigma_0}{\Sigma_{0,max}} \right)^2 + \beta \left(\frac{\Sigma_0}{\Sigma_{0,max}} \right)^{m+2} \quad (47)$$

avec α, β deux paramètres représentant respectivement les amplitudes des régimes primaire et secondaire présents sur les courbes d'AE, $m+2$ représentant la pente du régime secondaire et $\Sigma_{0,max}$ l'amplitude du dernier palier de chargement. Le paramètre β est donné par la relation suivante

$$\beta = \frac{4}{h_{site}} \frac{m}{S_0^m} \frac{V_{site}}{V_0} \frac{\Sigma_{0,max}^{m+2}}{(m+1)(m+2)} \quad (48)$$

Cette formulation montre que la description des courbes d'auto-échauffement obtenue par le modèle proposé est en accord avec les observations expérimentales. L'intensité du premier régime est liée à la dissipation de la matrice, avec une pente proche de 2. L'intensité du deuxième régime est associée à la dissipation de la population des sites et la pente du deuxième régime, $m+2$, est une caractéristique de l'apparition progressive des sites actifs. Cette formulation correspond à la formulation analytique proposée dans la section précédente. Dans la Figure 6, Figure 7 et Figure 8, la courbe de dissipation ainsi obtenue est affichée avec le modèle et les points expérimentaux.

1.3.5. Prévoir le comportement en fatigue à partir des ingrédients des courbes d'auto-échauffement

Pour faire le lien entre la description des mesures d'auto-échauffement et le modèle prédictif de tenue à la fatigue à grande nombre de cycles, l'hypothèse que seul le régime secondaire conduira à rupture est utilisée conformément aux observations expérimentales. La description de ce second régime étant lié à l'activation des sites, c'est le cadre du P.P.P. qui va permettre de faire ce lien, notamment en considérant l'hypothèse du maillon le plus faible.

1.3.5.1. Durée de vie illimitée

Dans le cadre du processus ponctuel de Poisson (P.P.P) la probabilité d'activation des sites est donnée par

$$P_k(V) = \frac{(\lambda V)^k}{k!} e^{-\lambda V}, \tag{49}$$

où k est le nombre de sites actifs et λ est la densité du processus.

L'hypothèse du maillon plus faible est alors considérée pour décrire l'endurance en fatigue. La probabilité de rupture est alors donnée par la probabilité de trouver au moins un site actif, qui correspond à un moins celle de ne trouver aucun site actif

$$P_F \ = \ P_{k\geq 1} = 1 - P_{k=0} = 1 - \exp\left[-\frac{V}{V_0}\left(\frac{\Sigma_0}{S_0}\right)^m\right], \tag{50}$$

Comme les contraintes et les déformations ne sont pas homogènes dans le domaine d'étude, pour une analyse complète, il est nécessaire de prendre en compte ces hétérogénéités. Dans ce cas-là, il est possible de définir une variable H_m liée à cette hétérogénéité (Hild et al., 1992). Il est ainsi considéré un volume effectif tel que $V_{eff} = V \times H_m$. La Probabilité à rupture est alors donnée par

$$P_F \ = \ P_{k\geq 1} = 1 - P_{k=0} = 1 - \exp\left[-\frac{V_{eff}}{V_0}\left(\frac{\Sigma_m}{S_0}\right)^m\right], \tag{51}$$

avec $H_m \ = \frac{1}{V}\int_V \left(\frac{\Sigma_0}{\Sigma_m}\right)^m dV$, où $\Sigma_m = \max_V(\Sigma_0)$ (Hild et al., 1992). Ce résultat correspond au modèle de Weibull (Weibull, 1951).

Finalement, la limite d'endurance moyenne a deux millions de cycles est donnée par

$$\overline{\Sigma}_\infty = \int_0^\infty \frac{\Sigma_m dP_F}{d\Sigma_m} d\Sigma_m = S_0 \left(\frac{V_0}{V_{eff}}\right)^{\frac{1}{m}} \Gamma\left(1 + \frac{1}{m}\right), \tag{52}$$

et son écart type est donnée par

$$\overline{\overline{\Sigma}}_\infty = \left[\int_0^\infty \left(\Sigma_m^2 - \overline{\Sigma}_\infty{}^2\right) \frac{dP_F}{d\Sigma_m} d\Sigma_m\right]^{\frac{1}{2}} = S_0 \left(\frac{V_0}{V_{eff}}\right)^{\frac{1}{m}} \sqrt{\Gamma\left(1 + \frac{2}{m}\right) - \Gamma^2\left(1 + \frac{1}{m}\right)}, \tag{53}$$

où $\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} \exp(-t)\, dt$, et son coefficient de variation CV est donné par

$$CV = \frac{\overline{\overline{\Sigma}}_\infty}{\overline{\Sigma}_\infty} = \frac{\sqrt{\Gamma\left(1 + \frac{2}{m}\right) - \Gamma^2\left(1 + \frac{1}{m}\right)}}{\Gamma\left(1 + \frac{1}{m}\right)}. \tag{54}$$

Ainsi, seul le paramètre m possède une influence par rapport à la dispersion. Si m est faible, la dispersion est importante et si m est élevé, la dispersion est faible, comme montre la Figure 14(c).

1.3.5.2. Durée de vie limitée

Pour traiter le cas de l'endurance limitée (inférieure à 2 millions de cycles), il est nécessaire de prévoir les courbes S-N-P. Afin de déterminer le nombre de cycles à amorçage, l'existence d'une certaine énergie dissipée volumique critique (Charkaluk et al., 2002; Poncelet et al., 2010) pour le site amenant à amorçage est considéré. Comme pour chaque cycle, la densité d'énergie dissipé est constante avec les hypothèses de modélisation adoptées, l'énergie dissipée critique vérifie pour chaque probabilité de rupture P_F la relation suivante

$$E_c(P_F) = N_f \widetilde{D}_{site}(P_F), \tag{55}$$

avec N_f, le nombre de cycles à rupture, et où la densité d'énergie dissipée cyclique pour chaque probabilité de rupture est donnée par

$$\widetilde{D}_{site}(P_F) = \frac{4\overline{\Sigma}_\infty(P_F)}{h_{site}} < \Sigma_0 - \overline{\Sigma}_\infty(P_F) >, \tag{56}$$

avec $\overline{\Sigma}_\infty(P_F)$, la limite d'endurance associée à une probabilité de rupture donnée P_F. À partir des deux relations précédentes, il est possible de définir

$$N_f = \frac{A}{\overline{\Sigma}_\infty(P_F) < \Sigma_0 - \overline{\Sigma}_\infty(P_F) >}, \tag{57}$$

avec A est un paramètre matériau. À partir des mesures d'auto-échauffement, il est possible de trouver la limite d'endurance moyenne du matériau et ensuite avec cette valeur et une certaine probabilité de rupture (par exemple $P_F = 0{,}5$), il est possible trouver l'amplitude à rupture grâce à l'équation d'iso-probabilité suivante

$$\frac{\ln(1-P_F)}{\ln(1-0{,}5)} = \left(\frac{\overline{\Sigma}_\infty(P_F)}{\overline{\Sigma}_\infty(0{,}5)}\right)^m \tag{58}$$

où il peut être supposé que

$$\overline{\Sigma}_\infty(0{,}5) = \overline{\Sigma}_\infty \left(\frac{ln(2)^{\frac{1}{m}}}{\Gamma\left(1+\frac{1}{m}\right)}\right) \approx \overline{\Sigma}_\infty \tag{59}$$

Pour conclure, cette section a présenté une modélisation probabiliste à deux échelles a même de décrire les courbes d'auto-échauffement et les courbes S-N-P. Ainsi elle permet d'établir un lien rationnel entre ces deux essais. Il a notamment été montré que la dissipation cyclique était une fonction puissance $m + 2$ (pente du régime secondaire) et que ce même paramètre pilotait la dispersion de la tenue à la fatigue. Ce lien repose sur trois éléments : 1. l'utilisation d'un P.P.P. pour décrire l'activation de sites où la microplasticité devient plus intense ; 2. La densité moyenne de sites actifs suit une loi puissance m en fonction de l'amplitude du chargement ; 3. L'hypothèse du maillon le plus faible est considéré pour décrire le comportement en fatigue. Lors du dialogue entre cette modélisation et l'approche développée dans ce manuscrit, ces trois points seront discutés.

1.4. Objectifs de l'étude

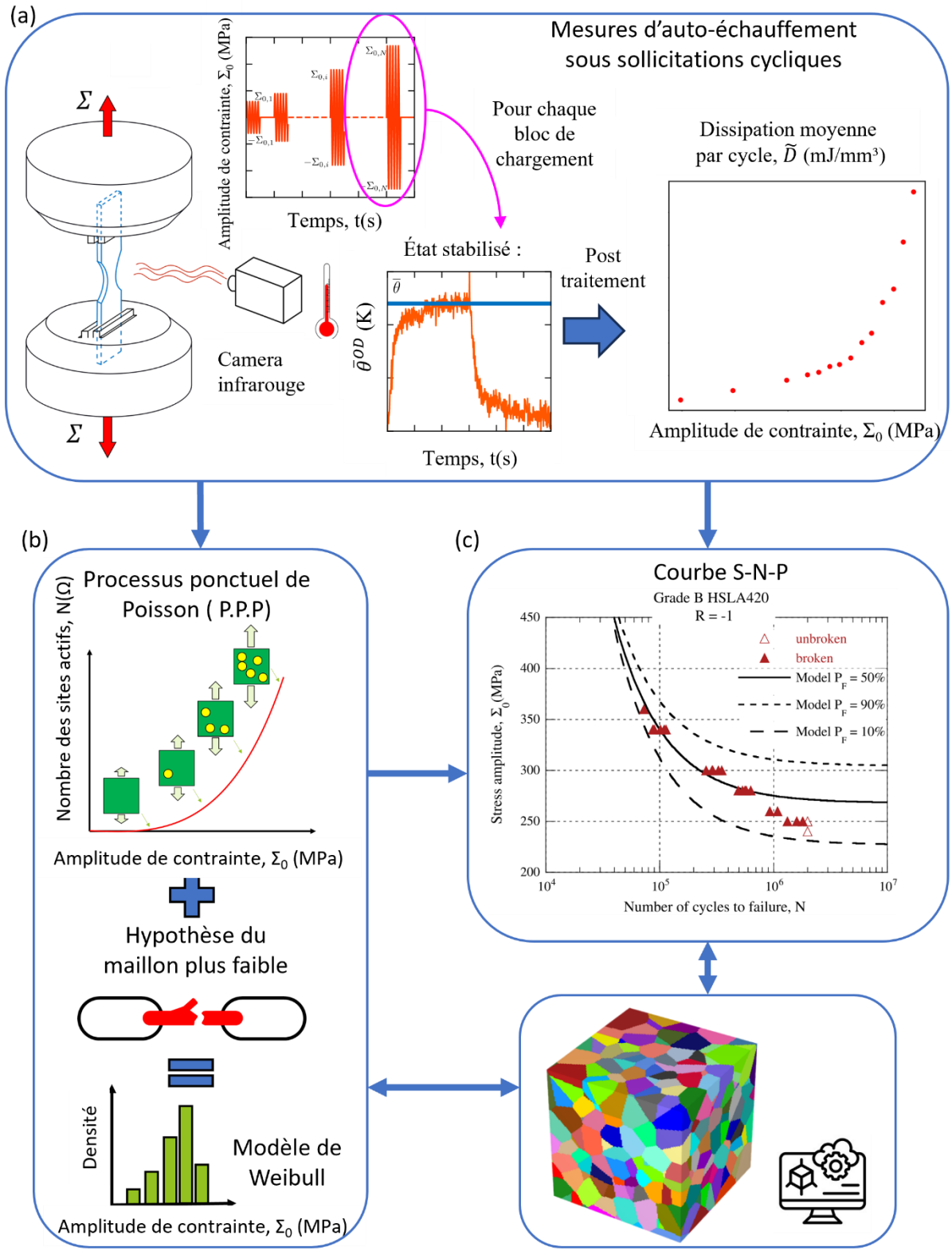


Figure 15. Méthode de l'auto-échauffement, modèle probabiliste à deux échelles et courbe S-N-P et l'agrégat polycristallin

Les études antérieures sur la fatigue, en particulier celles portant sur le lien entre l'amorçage des fissures et l'auto-échauffement sous chargements cycliques, sont

principalement de nature phénoménologique. Certaines d'entre elles sont basées sur l'utilisation d'un modèle probabiliste à deux échelles dont les éléments de base ont été décrit dans ce chapitre. Il consiste à considérer le volume élémentaire représentatif (VER) comme constitué d'une matrice contenant une population de sites potentiellement activables, représentant les zones susceptibles de dissiper plus fortement à plus forte amplitude. L'activation de ces sites est décrite par l'utilisation d'un Processus Ponctuel de Poisson, qui couplé à l'hypothèse du maillon le plus faible, permet d'obtenir un modèle prédictif du comportement en fatigue polycyclique. Cette approche a été validée sur de nombreux alliages métalliques et pour différentes natures de chargement (Ezanno et al., 2013; Mion et al., 2025; Sévédé, 2025).

Le modèle, bien que phénoménologique, est basé sur des constations microscopiques. Pour analyser, directement, le comportement mécanique à l'échelle de la microstructure, l'homogénéisation numérique par champs complets constitue une approche particulièrement pertinente, rendue possible grâce aux avancées significatives des méthodes et des moyens numériques au cours des deux dernières décennies (A. Lebensohn, 2001; Barbe et al., 2001; Méric et al., 1991; Miehe et al., 1999). Elle permet d'établir un lien entre la microstructure et le comportement macroscopique en modélisant, par exemple, l'influence de paramètres tels que l'anisotropie élastique, la distribution des orientations cristallographiques, la loi de comportement, la texture ou la taille des grains.

Dans ce cadre, le volume élémentaire représentatif (VER) n'est plus schématisé par une matrice et des inclusions sphériques élasto-plastiques (cf. section 1.3), mais par un agrégat polycristallin, constitué de grains aux formes, tailles et orientations diverses (Figure 15). L'homogénéisation par champs complets consiste à résoudre un problème de conditions limites appliqué à ce VER, généralement au moyen de la méthode des éléments finis (FEM). Le comportement global de l'agrégat est alors obtenu à partir de la réponse individuelle de chaque grain, décrite par la plasticité cristalline (Asaro, 1983; Busso & Cailletaud, 2005; Forest & Rubin, 2016; McDowell, 2007; Méric et al., 1991; Peirce et al., 1983). Cette dernière permet de prendre en compte des phénomènes essentiels tels que la plasticité cyclique, l'écrouissage cinématique ou encore l'effet rochet. Les résultats issus de cette approche fournissent non seulement les contraintes et les déformations locales, mais également des variables internes comme la dissipation intrinsèque, importante à l'analyse micromécanique de la fatigue.

La méthode des éléments finis présente l'avantage d'être largement diffusée, de disposer de codes robustes. Toutefois, son application aux agrégats polycristallins reste très coûteuse en ressources informatiques.

Une alternative prometteuse est la méthode de la transformée de Fourier rapide (FFT), introduite par Moulinec et Suquet (Moulinec & Suquet, 1994). Cette approche reformule les équations d'équilibre d'un milieu périodique hétérogène en équations équivalentes dans un milieu de référence, soumises à des forces fictives. Grâce à ses performances numériques, la

FFT permet de traiter des VERs très détaillés tout en réduisant significativement le coût de calcul par rapport à la FEM (Eisenlohr et al., 2013). Le gain lié à la parallélisation des calculs est énorme. Depuis son introduction, elle a été appliquée avec succès à l'homogénéisation de composites (Gélébart & Ouaki, 2015; Kabel et al., 2014), aux grandes déformations (Lahellec et al., 2003), aux matériaux poreux (Lebensohn & Cazacu, 2012; To & Bonnet, 2020) et aux agrégats polycristallins (Eisenlohr et al., 2013; Gélébart, 2021; Lucarini et al., 2023; Marano et al., 2019).

Cependant, la littérature reste limitée concernant l'étude de la dissipation intrinsèque d'un agrégat polycristallin sous chargement cyclique de faible amplitude. La dissipation constitue un paramètre clé pour relier l'échelle microstructurale au comportement en fatigue, puisqu'elle peut fournir des indicateurs sur la durée de vie et la dispersion. Par exemple, Busso & Cailletaud (Busso & Cailletaud, 2005) ont proposé une formulation générale de la dissipation en comparant différentes lois de comportement ; Korsunsky et al. (Korsunsky et al., 2007) ont identifié les grains fortement dissipatifs comme zones probables d'amorçage de fissures ; Lu et al. (Lu et al., 2016) ont utilisé la FEM pour prédire les fissures à partir de la déformation plastique locale et de la dissipation d'énergie ; Li et al. et Yuan et al. (Y. Li et al., 2023; Yuan et al., 2020) ont employé la dissipation comme indicateur de la fatigue oligocyclique ; enfin, Lucarini et al. (Lucarini et al., 2023) ont exploité la FFT pour modéliser l'amorçage de fissures en considérant l'énergie stockée comme force motrice. À ce jour, aucune étude n'a encore établi de lien explicite entre l'auto-échauffement et la plasticité cristalline.

C'est dans ce contexte que s'inscrivent les travaux de cette thèse, avec les objectifs suivants :

- Exploiter des simulations numériques d'agrégats polycristallins afin d'étudier l'évolution de la dissipation sous chargement cyclique de faible amplitude, aussi bien du point de vue qualitatif que quantitatif.
- Établir un lien entre le modèle probabiliste à deux échelles et le modèle polycristallin, en reliant l'hypothèse du maillon le plus faible au comportement à l'échelle du polycristal, notamment via la notion de limite d'endurance.
- Procéder à une analyse critique des hypothèses du modèle probabiliste à deux échelles**,** à partir des résultats issus des simulations numériques d'agrégats.
- Analyser la signification physique d'un « site d'activation plastique » dans le cadre du modèle probabiliste à deux échelles.
- Comparer la pente du régime secondaire de l'auto-échauffement à celle de l'évolution du nombre de sites actifs**,** afin d'évaluer la cohérence entre description énergétique et description statistique de l'activation.
- Étudier le scénario d'apparition des sites**,** en analysant leur distribution, leur séquence d'activation et leur contribution à la dissipation globale.

Dans le chapitre suivant, les choix effectués pour la constitution des agrégats polycristallins étudiés sont présentés et justifiés. Dans un premier temps, l'objectif est de reproduire le régime secondaire (chapitres 3 et 4), dans la mesure où son lien avec la fatigue est établi expérimentalement. Dans un second temps, il s'agit de décrire le régime primaire (chapitre 5).

Chapitre 2 : Homogénéisation numérique de l'agrégat polycristallin

Sommaire

Introduction 42
2.1. Génération des agrégats polycristallins 43
2.1.1. Génération de la *tessellation* 43
2.1.2. Distribution des orientations cristallographiques 45
2.2. Loi de comportement en plasticité cristalline 48
2.2.1. Historique des modèles en plasticité cristalline 48
2.2.2. Présentation de la loi de comportement 49
2.3. Homogénéisation numérique 52
2.3.1. Méthode de champs complets : FEM versus FFT 52
2.3.2. Homogénéisation basée sur la Transformé de Fourier Rapide (FFT) 53
2.3.3. Schéma d'intégration implicite de la loi 55
2.4. Agrégat polycristallin : Chargement uniaxial de traction-compression 56
2.4.1. Comportement mésoscopique : évolution de la contrainte nominale 57
2.4.2. Influence du raffinement du maillage 61
2.4.3. Influence du nombre de tirages des orientations sur la dissipation moyenne par cycle 65
2.4.4. Influence du nombre de grain sur la dissipation moyenne par cycle 66
2.4.5. Influence des paramètres de la loi de comportement 68
2.4.6. Influence des conditions limites 69
2.5. Conclusion 72

Introduction

Pour étudier la dissipation d'un matériau polycristallin soumis à un chargement cyclique, un volume élémentaire représentatif (VER) est simplement analysé ce qui permettra d'obtenir les propriétés effectives du matériau. En homogénéisation numérique, le VER correspond au volume minimal d'un échantillon capable de reproduire, en moyenne, les propriétés globales du matériau (Drugan & Willis, 1996).

Dans cette étude, le VER est représenté par un agrégat, constitué de plusieurs grains, de formes, de tailles et d'orientations cristallographiques différentes. La taille du VER et l'analyse de ses propriétés dépendent directement de la microstructure du matériau ainsi que de la distribution statistique des caractéristiques et de l'orientation des grains. L'objectif est d'obtenir un agrégat présentant une faible texture et une faible hétérogénéité des tailles de grains.

Lorsqu'un tel agrégat est soumis à une sollicitation mécanique, l'état de contrainte diffère d'un grain à l'autre, en raison d'orientations différentes, des hétérogénéités locales et des effets de voisinage. L'analyse de ces états peut être réalisée par des techniques expérimentales telles que la diffraction des rayons X ou la diffraction d'électrons rétrodiffusés (EBSD) en microscopie électronique à balayage (SEM). Ces observations montrent que la compréhension des champs de contrainte est essentielle pour mieux comprendre la plasticité à l'échelle microscopique, souvent désignée sous le terme de micro-plasticité.

Dans ce contexte, ce chapitre s'intéresse à la modélisation numérique en plasticité cristalline d'un agrégat polycristallin. L'objectif est d'étudier les champs de contrainte ainsi que la dissipation locale et globale du matériau sous sollicitations de faible amplitude (i.e., correspondant au domaine de la fatigue à grand nombre de cycles), en analysant l'influence de plusieurs paramètres tels que le nombre de grains, le tirage des orientations, le raffinement du maillage ou encore les conditions aux limites. L'approche repose sur une loi de comportement élasto-viscoplastique avec uniquement un écrouissage cinématique linéaire et, en considérant les hypothèses suivantes : petites déformations, interfaces parfaites entre les grains, et petites rotations.

L'algorithme numérique utilisé pour résoudre les problèmes de plasticité cristalline est basé sur la Transformée de Fourier Rapide (FFT). Cette méthode, en plein essor ces dernières années, a démontré sa supériorité sur la méthode des éléments finis (EF) pour les milieux périodiques, car l'accélération due à la parallélisation est presque linéaire (relation entre le nombre de CPU et le temps de calcul).

Ainsi, le chapitre est organisé comme suit :

- La première section présente la génération des agrégats polycristallins, la méthode de *tessellation* choisie, le tirage d'orientation associé ainsi que les conditions aux limites ;
- La deuxième section expose la loi de comportement en plasticité cristalline adoptée et son intégration ;
- La troisième section est consacrée à l'implémentation numérique de la méthode FFT et au schéma implicite utilisé pour la résolution ;
- La quatrième section est dédiée à la validation du modèle numérique, avec une analyse du champ de contraintes et de la dissipation intrinsèque par rapport à l'influence de différents paramètres tels que : le tirage d'orientation, la *tessellation*, le nombre de grains, le raffinement du maillage, les paramètres élasto-viscoplastiques de la loi de comportement et les conditions aux limites.

2.1. Génération des agrégats polycristallins

Expérimentalement, la microstructure est généralement obtenue à partir de la diffraction d'électrons rétrodiffusés (EBSD) (Figure 16(a)). Avec les progrès technologiques, plusieurs logiciels de génération de microstructures ont été développés, tels que Neper (Quey et al., 2011) ou DREAM.3D (Groeber & Jackson, 2014). Ces outils permettent de créer des microstructures virtuelles représentatives de celles observées expérimentalement (Figure 16(b)). L'organisation de cette section suit la logique suivante : génération d'une tessellation avec Neper, présentation de la distribution des orientations d'un agrégat polycristallin, puis discussion et justification du choix du nombre de grains.

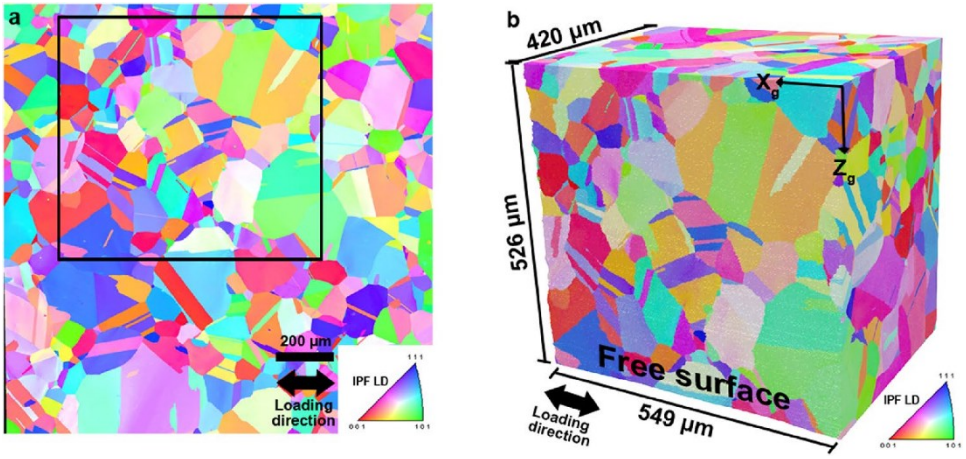


Figure 16. (a) Microstructure voxelisée en 3D. (a) Carte de figure de pôle inverse référencée selon la direction de chargement, obtenue à partir de mesures EBSD de surface après déchargement de l'éprouvette ayant subi une déformation plastique macroscopique de 1,26 %. (b) Reconstruction 3D des données de l'expérience TriBeam provenant d'une région contenant un sous-ensemble de la surface libre indiquée par le cadre noir en (a). à partir du logiciel DREAM.3D (Stinville et al., 2022)

2.1.1. Génération de la *tessellation*

Pour générer la *tessellation* de la microstructure ainsi que son maillage, le logiciel Neper (Quey et al., 2011) a été utilisé. Ce dernier peut produire des représentations sous

forme voxélisée, d'un agrégat contenant pour chaque voxel l'identifiant du grain (numéro unique associé au grain auquel il appartient) ainsi que son orientation cristalline (définie par les trois angles d'Euler) et ses paramètres matériaux. Par ailleurs, Neper permet de créer des agrégats polycristallins en fonction de plusieurs paramètres, tels que le nombre de grains, leur forme, leur taille et la distribution de leurs orientations (Quey et al., 2011).

Afin de prendre en compte l'hétérogénéité des polycristaux et la répartition des grains, un modèle de tessellation aléatoire a été adopté. La littérature propose plusieurs approches géométriques pour modéliser la structure des métaux, notamment la *tessellation* de Laguerre (Lautensack & Zuyev, 2008) et celle de Voronoï (Gilbert, 1962). Dans cette étude, la *tessellation* de Voronoï a été choisie.

Le modèle des polyèdres de Voronoï (Gilbert, 1962) est particulièrement adapté à la génération de polycristaux aléatoires en raison de ses propriétés géométriques. Il permet de définir des frontières planes entre les grains et reproduit certains processus de formation morphologique, où des germes croissent de manière isotrope et à un taux constant à partir de points initiaux distribués aléatoirement (Barbe, 2000).

Les polyèdres de Voronoï sont définis mathématiquement comme les régions d'influence associées à un ensemble spécifique de points servant de centres. Soit D un sous-ensemble de $\mathbb{R}^3$ et $E = \{A_\mathrm{i}\}$ un ensemble de N points aléatoires représentant les centres des grains dans le domaine D. En notant $d(P_1, P_2)$ la distance euclidienne entre deux points P_1 et P_2, la région d'influence du point A_i est donnée par :

$$\Omega_{A_i} = \left\{ P(x,y,z) \in D \mid d(P,A_i) \leq d\left(P,A_j\right),\ \forall j \neq i \right\} \qquad (60)$$

D'un point de vue physique, un point P appartient à la région d'influence du germe A_i s'il est plus proche de ce dernier que de tout autre germe. Cette règle d'attribution conduit naturellement à la formation d'un polyèdre de Voronoï autour de chaque centre A_i. L'ensemble des régions Ω_{A_i} constitue ainsi une tessellation aléatoire du domaine D en N cellules, où chaque germe A_i définit une région unique (Barbe, 2000).

Les positions des centres sont généralement générées à l'aide d'un processus ponctuel de Poisson, ce choix garantissant une répartition homogène des germes dans le domaine. Dans ce cadre, les coordonnées de chaque germe sont traitées comme des variables aléatoires indépendantes et uniformément distribuées dans D. Dans la Figure 17, un résumé de la procédure de génération des tessellations est montrée. La première étape consiste dans la génération aléatoire des points dans l'espace, ensuite c'est la génération des germes et en fin c'est la construction finale de polyèdres de Voronoï.

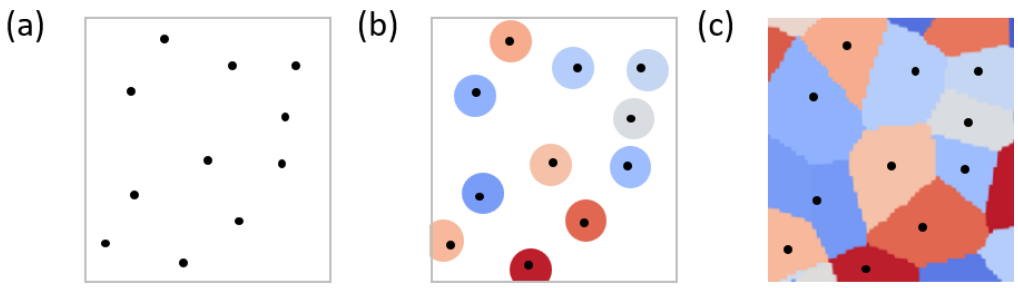


Figure 17.(a) Disposition aléatoire de points dans l'espace, (b) génération des germes à partir d'une distance à points fixes, (c) construction finale des polyèdres de Voronoï

La Figure 18(a) présente un exemple de VER de 1 mm³ réalisé avec Neper, tandis que la Figure 18(b) montre la distribution des diamètres des grains pour ce même tirage. Cette distribution suit une loi log-normale avec une faible dispersion, comme il est souhaité.

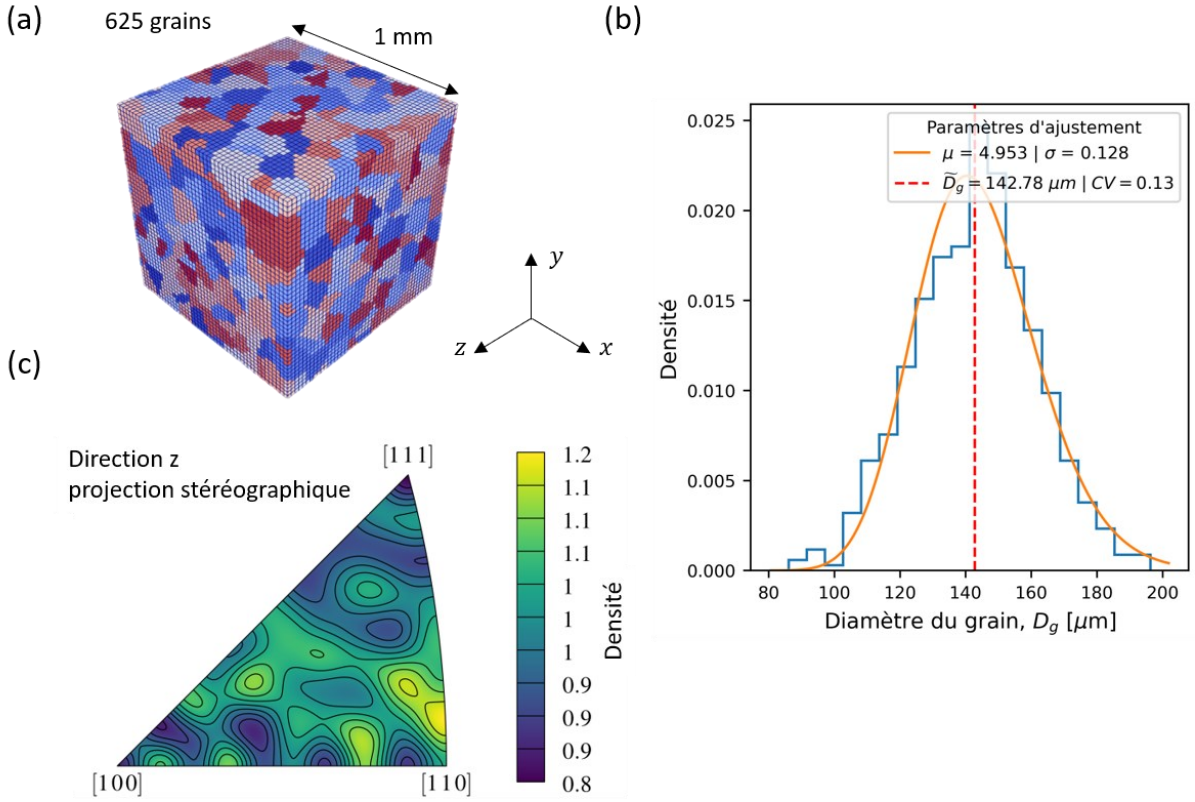


Figure 18. Exemple d'un VER contenant 625 grains (a), distribution correspondante des diamètres des grains (b) et distribution des orientations correspondante issue d'une figure pôle inverse (c). μ et σ représentent respectivement la valeur moyenne et l'écart-type du logarithme naturel du diamètre des grains. $\widetilde{D_g}$ fait référence à la valeur moyenne du diamètre des grains, et CV correspond au coefficient de variation

2.1.2. Distribution des orientations cristallographiques

Pour décrire la distribution cristallographique, deux systèmes de repères sont distingués : le premier (x_g, y_g, z_g) correspond au repère global du VER, dans lequel le chargement est appliqué, tandis que le second (x_c, y_c, z_c) correspond au repère local cristallographique associé à chaque grain de l'agrégat (Figure 19(a)). L'orientation de chaque

grain est décrite à l'aide de la formulation classique basée sur les angles d'Euler (Esling et al., 1982). Ces derniers sont définis par trois angles : $\phi_1 \in [0, 2\pi[$,$\phi \in [0, \pi[$ et $\phi_2 \in [0, 2\pi[$ (Figure 19(b)).

La Figure 20(a–d) présente la distribution des angles d'Euler ainsi que la figure de pôles inverses pour un agrégat constitué de 10 000 grains. Les orientations cristallographiques ont été attribuées à partir d'angles tirés de manière aléatoire, selon deux approches distinctes de génération : le *random sampling* et l'*uniform sampling*.

Dans le cas du *random sampling*, les orientations sont générées indépendamment les unes des autres, à partir de variables aléatoires uniformément distribuées. Chaque grain reçoit ainsi une orientation aléatoire sans corrélation avec les autres. Cette méthode produit une texture globalement isotrope, mais la répartition des orientations dans l'espace des rotations peut présenter localement des irrégularités ou des regroupements fortuits.

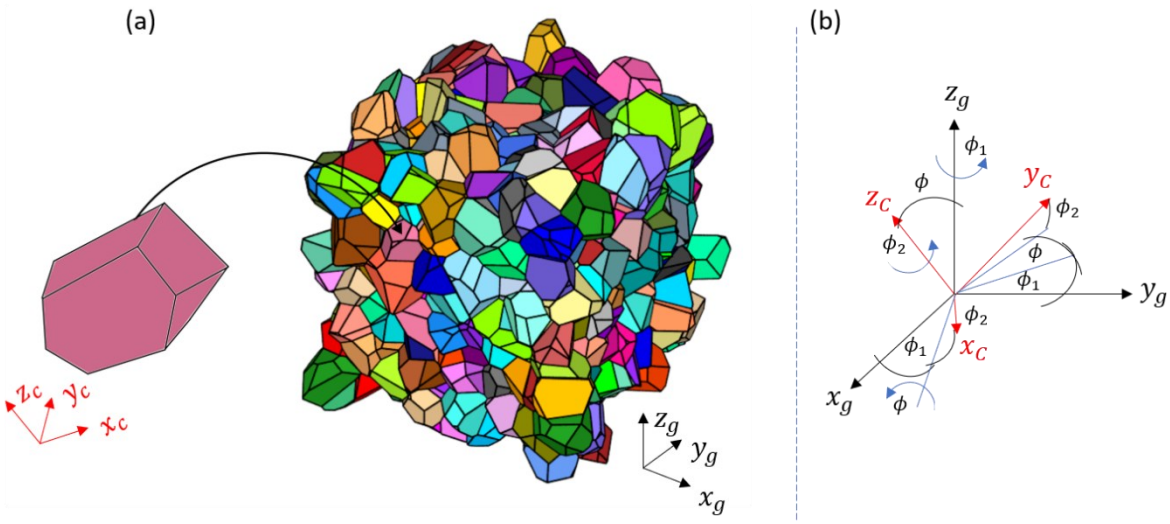


Figure 19.(a) Agrégat polycristallin constitué de 625 grains. (b) Schéma des angles d'Euler

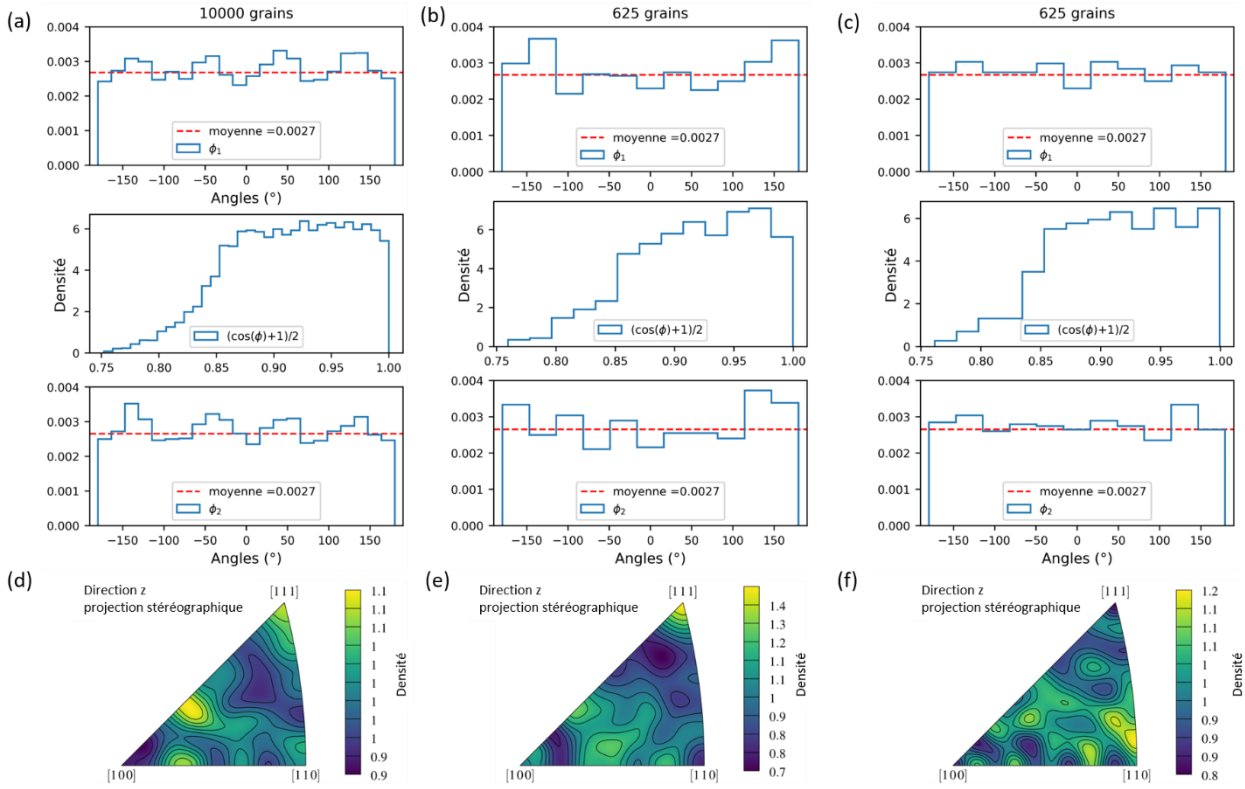


Figure 20. Distribution des tirages d'orientations cristallographiques basée sur les angles d'Euler pour 10 000 grains et l'option random sampling (a) et 625 grains avec l'option random sampling (b), (c) 625 grains et l'option uniform sampling, ainsi que les figures de pôles inverses associées (d),(e) (f), respectivement. La ligne pointillée rouge représente la densité moyenne de ϕ_1 et de ϕ_2.

À l'inverse, l'*uniform sampling* repose sur un algorithme d'uniformisation des orientations, implémenté dans le logiciel Neper (Quey et al., 2018). Celui-ci repose sur une représentation quaternionique des orientations, considérées comme des points répartis sur la 3-sphère S^3, et vise à les distribuer de manière quasi-régulière afin d'assurer une couverture homogène de l'espace des orientations. Autrement dit, cette méthode minimise les variations locales de densité d'orientation et évite les concentrations aléatoires.

Ainsi, les Figure 20(a, b) illustrent la distribution obtenue par *random sampling*, tandis que la Figure 20(c) correspond à celle issue de l'*uniform sampling*. Dans les trois cas, il est obtenu un agrégat faiblement texturé (Figure 20(d-f)), ce qui correspond à notre hypothèse de modélisation d'une texture aléatoire. Toutefois, la génération uniforme présente un coût de calcul plus élevé, car elle nécessite une étape d'optimisation de la distribution des orientations.

Dans la suite de l'étude, le choix s'est porté sur un agrégat de 625 grains généré par *uniform sampling*, permettant d'obtenir une distribution d'orientations faiblement texturée. La texture cristallographique constitue en effet un paramètre clé susceptible d'influencer fortement la réponse mécanique du matériau en plasticité cristalline, notamment en ce qui concerne la mise en forme. Plusieurs études menées sur les aciers ont d'ailleurs mis en évidence cet effet (Q. Li et al., 2020; Xie & Nakamachi, 2002).

2.2. Loi de comportement en plasticité cristalline

2.2.1. Historique des modèles en plasticité cristalline

Les premières simulations éléments finis des modèles en plasticité cristalline apparaissent au début des années 1980. Aux États-Unis, Peirce et al. (Peirce et al., 1982) réalisent une implémentation en éléments finis permettant de simuler le comportement en traction d'un monocristal. En raison des limitations numériques de l'époque, leur modèle ne considère que deux systèmes de glissement. Cette approche est ensuite étendue aux agrégats polycristallins par Harren et al. (Harren et al., 1988). Parallèlement, en France, Cailletaud (Cailletaud, 1988) développe un modèle micro-macro intégrant les interactions entre systèmes de glissement et capable de reproduire l'effet Bauschinger, ouvrant la voie à une modélisation plus réaliste du comportement cyclique.

En 1991, Becker met au point aux États-Unis une simulation utilisant les douze systèmes de glissement d'un cristal CFC (Becker, 1991; Becker et al., 1991). Il applique ce modèle à l'étude de la déformation en matrice de polycristaux colonnaires ainsi qu'au comportement de monocristaux. En France, Méric et al. (Méric et al., 1991, 1994) proposent un modèle viscoplastique micro-macro permettant de simuler avec précision les réponses contrainte-déformation de monocristaux et bicristaux, en particulier pour les superalliages monocristallins utilisés dans les turbines de réacteur d'avion.

L'augmentation des performances numériques des ordinateurs permet ensuite le développement massif de simulations sur agrégats monocristallins et polycristallins, en 2D comme en 3D. Plusieurs travaux, tels que ceux de Sarma et al.,Mika et al. (1998) ou Sachtleber et al. (Mika & Dawson, 1998; Sachtleber et al., 2002; Sarma & Dawson, 1996), étudient de manière détaillée les interactions entre grains et l'origine des hétérogénéités locales. Pilvin (Pilvin, 1998) propose une approche simplifiée pour représenter l'effet des surfaces sur le comportement global du polycristal. De son côté, Barbe (Barbe, 2000) met en évidence l'importance des effets de voisinage intergranulaire dans la localisation du glissement et soulignent l'influence notable de la taille des grains sur la réponse globale du volume élémentaire représentatif. En parallèle, des méthodes d'homogénéisation sont développées pour appliquer la plasticité cristalline aux procédés industriels de mise en forme, notamment les travaux de Raabe et Rooters (Raabe & Roters, 2004) sur les composantes de texture et ceux de Tóth (Tóth & Van Houtte, 1992) sur l'échantillonnage direct de *l'orientation discret function* (ODF).

À partir des années 2000, plusieurs avancées majeures apparaissent dans les formulations constitutives. Evrard et al. (Evrard et al., 2008) proposent de modifier la loi monocristalline classique utilisée dans les modèles polycristallins de Pilvin (Pilvin, 1990) et Cailletaud (Cailletaud, 1992) afin de reproduire l'adoucissement cyclique observé lors d'essais de fatigue oligocyclique contrôlés en déformation. S'appuyant sur des observations

expérimentales montrant une réorganisation des dislocations en zones dures et zones molles au sein des grains, ils introduisent un modèle composite dans lequel chaque système de glissement est constitué d'une contribution « dure » et d'une contribution « molle ». Cette approche est ensuite reprise et étendue par Feaugas et Pilvin (Feaugas & Pilvin, 2009). Dans la continuité des développements constitutifs, Forest et Rubin (Forest & Rubin, 2016) proposent un modèle multicritère avec sur-contrainte permettant une transition élasto-plastique lissée et indépendante du taux de déformation, cadre théorique qui sera par la suite exploité notamment par Farooq et al. (Farooq et al., 2020).

Par ailleurs, pour prendre en compte les effets d'échelle, les premières théories phénoménologiques à gradient de déformation, issues notamment des travaux de Fleck et Hutchinson (Fleck et al., 1994) sont intégrées dans des cadres de plasticité cristalline. De nouvelles lois de comportement physiquement fondées émergent également, basées sur l'évolution de densités de dislocations (Arsenlis et al., 2004; Gao & Huang, 2003) . Dans cette même logique, Dunne et al. (Dunne et al., 2007) proposent un modèle fondé sur la théorie des dislocations, qui sera repris et approfondi dans des travaux plus récents, notamment par Lucarini et al. (Lucarini et al., 2023).

La plasticité cristalline a également été largement utilisée pour étudier l'amorçage des fissures et la fatigue. Des critères locaux basés sur le cisaillement résolu ou la dissipation d'énergie ont été proposés (Korsunsky et al., 2007; Manonukul & Dunne, 2004; McDowell, 2007; McDowell & Dunne, 2010). L'intégration de l'évolution des densités de dislocations au service de la prédiction en fatigue (Boeff et al., 2017) et des études récentes confirment le rôle central de la localisation du glissement, notamment dans les superalliages (Charpagne et al., 2021; Stinville et al., 2022). Enfin, les travaux de Robert et Guerchais (Guerchais et al., 2014; Robert et al., 2012) montrent que la plasticité cristalline décrit efficacement les champs mécaniques sous chargements multiaxiaux et l'influence de l'anisotropie cristallographique.

Dans le cadre de cette étude, le modèle de plasticité cristalline développé initialement par Méric-Cailletaud (Méric et al., 1991) est utilisé pour analyser le comportement mécanique de de l'agrégat.

2.2.2. Présentation de la loi de comportement

Le modèle Méric-Cailletaud (Méric et al., 1991) est écrit au niveau de chaque système de glissement, s, qui est constitué des plans présentant une densité linéaire et planaire plus élevée (Jackson, 1991). L'hypothèse des petites déformations est considérée, et la rotation des grains ainsi que les interactions entre les systèmes de glissement sont négligées. L'écrouissage isotrope n'est pas considéré en accord avec les résultats expérimentaux obtenus sur de nombreux matériaux (mais pas tous) où une dissipation cyclique constante est obtenue très rapidement. Cela aura aussi le mérite d'atteindre un comportement cyclique stable en

quelques cycles. L'étude du cas de matériaux nécessitant l'introduction d'un écrouissage isotrope fait partie des perspectives à ce travail.

Toutes les équations suivantes sont décrites dans le repère du cristal. La déformation totale, $\underline{\underline{\varepsilon_t}}$, se décompose en une partie élastique $\underline{\underline{\varepsilon_e}}$ et une partie viscoplastique $\underline{\underline{\varepsilon_{vp}}}$. Une loi d'élasticité linéaire est adoptée, avec un tenseur d'élasticité orthotrope, $\underline{\underline{\underline{\underline{C}}}}$, dont les composantes non nulles en notation de Voigt sont C_{11}, C_{12} et C_{44} . Il se met, dans le repère du cristal, sous la forme

$$\underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix}_{(x_c,y_c,z_c)} . \tag{61}$$

Le facteur de Zener, Z_n(Zener, 1947) est un indice utilisé pour la mesure de l'orthotropie est donné par

$$Z_n = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}}. \tag{62}$$

Une valeur de Z_n égale à 1 correspond à un matériau isotrope, tandis qu'une valeur différente de 1 traduit un caractère orthotrope au niveau global du VER.

Pour chaque système de glissement s, le tenseur de Schmid est défini comme $\underline{\underline{m^s}} = \frac{1}{2}\left(\underline{n^s} \otimes \underline{l^s} + \underline{n^s} \otimes \underline{l^s}\right)$ où $\underline{n^s}$ est la normale au plan de glissement et $\underline{l^s}$ est la direction du système de glissement. La force nécessaire pour activer le système de glissement est donnée par la contrainte de cisaillement résolue (Mandel, 1971)

$$\tau^s = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{m^s}} , \tag{63}$$

où $\underline{\underline{\sigma}}$ est le tenseur de contraintes de Cauchy. L'activation du glissement plastique est décrite par la fonction élastique $f^s = |\tau^s - x^s| - \tau^0 \leq 0$ où x^s et τ^0 sont respectivement l'écrouissage cinématique et la contrainte de cisaillement initiale définie au niveau du système de glissement. Le taux de glissement viscoplastique est donné par l'équation suivante (Méric et al., 1991),

$$\dot{\gamma^s} = \left\langle \frac{f^s}{K} \right\rangle^n sign(\tau^s - x^s), \tag{64}$$

où $\langle . \rangle = Max(.,0)$, K représentant la résistance au glissement, et *n* est l'inverse du taux de sensibilité de déformation (Asaro, 1983; Peirce et al., 1983). Le taux de déformation visco-plastique pour 1 grain est défini comme la somme de la contribution pour chaque système de glissement,

$$\underline{\underline{\dot{\varepsilon}_{vp}}} = \sum_{s=1}^{n^s} \dot{\gamma^s} \underline{\underline{m}}^s, \tag{65}$$

où n^s est le nombre de systèmes de glissement. L'évolution de l'écrouissage cinématique dans le système de glissement est donnée par $\dot{x^s} = c\dot{\alpha^s}$, où $\dot{\alpha^s} = \dot{\gamma^s} - d\alpha^s|\dot{\gamma^s}|$ où c et d sont les constantes associées à l'écrouissage. L'évolution de l'écrouissage est, finalement, donnée par $\dot{x^s} = c\dot{\gamma^s} - dx^s|\dot{\gamma^s}|$.

L'évolution de la dissipation est définie par (Busso & Cailletaud, 2005)

$$\dot{D} = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}_{vp}}} - \sum_{s=1}^{n^s} x^s \dot{\alpha^s}, \tag{66}$$

qui peut être réécrite sous la forme suivante

$$\dot{D} = \underline{\underline{\sigma}} : \sum_{s=1}^{n^s} \dot{\gamma^s} \underline{\underline{m}}^s - \sum_{s=1}^{n^s} x^s (\dot{\gamma^s} - d\alpha^s|\dot{\gamma^s}|)$$

$$\dot{D} = \sum_{s=1}^{n^s} \dot{\gamma^s} \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{m}}^s - \sum_{s=1}^{n^s} (x^s \dot{\gamma^s} - \frac{d}{c} {x^s}^2 |\dot{\gamma^s}|)$$

$$\dot{D} = \sum_{s=1}^{n^s} \dot{\gamma^s} \tau^s - \sum_{s=1}^{n^s} x^s \dot{\gamma^s} + \sum_{s=1}^{n^s} \frac{d}{c} {x^s}^2 |\dot{\gamma^s}|$$

$$\dot{D} = \sum_{s=1}^{n^s} [(\tau^s - x^s)\dot{\gamma^s} + \frac{d}{c} {x^s}^2 |\dot{\gamma^s}|]. \tag{67}$$

Dans la suite de l'étude, un écrouissage cinématique linéaire de Prager (Prager, 1956) est uniquement pris en compte, ce qui implique que d = 0 et

$$\dot{D} = \sum_{s=1}^{n^s} [(\tau^s - x^s)\dot{\gamma^s}]. \tag{68}$$

Pour cette étude, le matériau virtuel retenu aura des paramètres élastiques proche du Fe- α cubique centrée (CC). 24 systèmes de glissement seront considérés, le tenseur Schmid est construit à partir des vecteurs {1 1 0} <$\overline{1}$ 1 1> et {2 1 1} < $\overline{1}$ 1 1 > (Figure 21). Les paramètres matériaux sont présentés dans le Tableau 1. C_{11} , C_{12} et C_{44} proviennent de Kim and Johnson (2007), et τ^0 la valeur utilisée par Rogne and Thaulow (2014). Les paramètres K et n ont été

sélectionnés pour avoir une loi faiblement dépendante des valeurs de fréquence dans la gamme d'étude (voir section 2.4.5).

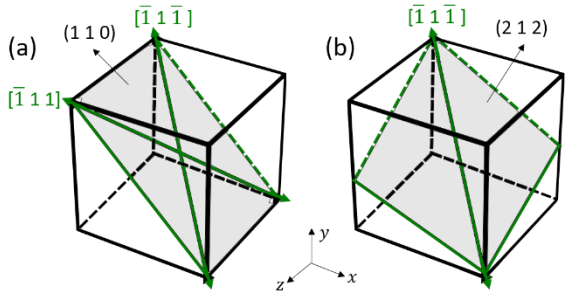


Figure 21. Systèmes de glissement pour le monocristal (a) {1 1 0} <$\bar{1}$ 1 1> et (b) {2 1 1} < $\bar{1}$ 1 1 >.

Paramètres	$C_{11}(GPa)$	$C_{12}(GPa)$	$2C_{44}(GPa)$	$\tau^0(MPa)$	$K(MPa)$	n	$c(MPa)$	Z_n
Valeurs	231,5	135	232	40	2	11	10000	2,4

Tableau 1. Paramètres mécaniques retenus pour notre étude

2.3. Homogénéisation numérique

Afin d'analyser le comportement mécanique à l'échelle de la microstructure, l'homogénéisation constitue une approche particulièrement pertinente. Elle permet d'établir un lien entre les phénomènes à l'échelle de la microstructure et le comportement macroscopique. Dans ce cadre, l'influence de certains paramètres (anisotropie élastique, distribution d'orientation, loi de comportement, texture et taille du grain) peut être étudiée. L'homogénéisation numérique est un problème non linéaire complexe, qui peut être résolu soit par des méthodes de champ moyen, e.g. (Molinari et al., 1987; Sachs, 1928; Taylor, 1938) où la microstructure est fortement simplifiée, soit par des méthodes de champs complets, e.g. (A. Lebensohn, 2001; Barbe et al., 2001; Méric et al., 1991; Miehe et al., 1999). Dans cette thèse la méthode de champs complets est utilisée.

2.3.1. Méthode de champs complets : FEM versus FFT

La méthode de champs complets consiste à résoudre un problème appliqué à un volume élémentaire représentatif (VER), le plus souvent à l'aide de la méthode des éléments finis (FEM). Le VER est alors considéré comme représentatif de la microstructure et son comportement global est obtenu à partir de la réponse de chaque grain. Celui-ci est décrit par la plasticité cristalline. L'un des atouts de la FEM est la disponibilité de nombreux codes numériques (*Abaqus*, s. d.) et la possibilité d'utiliser des schémas implicites efficaces pour résoudre des problèmes non linéaires, tout en représentant fidèlement des géométries complexes issues de maillages générés de façon plus ou moins automatiques.

Dans le domaine des simulations numériques sur les agrégats polycristallins, plusieurs chercheurs ont utilisé la FEM pour analyser les champs de contrainte et de déformation locales et macroscopique, e.g. (Barbe, 2000; Farooq et al., 2020; Lu et al., 2016; McDowell, 2007).

Néanmoins, son application présente certaines limites, comme le coût du calcul élevé. En raison de la variabilité des microstructures, plusieurs VERs doivent être générés et analysés sur quelques cycles, ce qui augmente le nombre de calculs à effectuer. Une alternative repose sur la discrétisation par voxels (Manonukul & Dunne, 2004; Yaghoobi et al., 2021). Cette approche permet de générer automatiquement des maillages, mais elle perd deux avantages de la FEM : l'adaptation du maillage à la géométrie réelle et une bonne discrétisation des contours de grains.

Mais la voxélisation permet d'utiliser la méthode de transformée de Fourier rapide (FFT). Développée par (Moulinec & Suquet, 1994), elle consiste à transformer les équations d'équilibre d'un système périodique hétérogène en équations d'équilibre dans un milieu de référence soumis à des forces équivalentes en reposant sur les équations de Lippmann-Schwinger (Lippmann & Schwinger, 1950) et à l'aide de la FFT. Cette méthode est aujourd'hui largement adoptée en raison de ses excellentes performances pour les milieux périodiques, qui permettent de travailler avec des VERs très détaillés, tout en réduisant considérablement le coût du calcul par rapport à la FEM (Eisenlohr et al., 2013). Depuis son introduction, elle a été utilisée avec succès pour homogénéiser la réponse mécanique des composites (Gélébart & Ouaki, 2015; Kabel et al., 2014), en grandes déformations (Lahellec et al., 2003), pour des matériaux poreux (Lebensohn & Cazacu, 2012; To & Bonnet, 2020) et des agrégats polycristallins (Eisenlohr et al., 2013; Gélébart, 2021; Lucarini et al., 2023; Marano et al., 2019). Il y existe plusieurs codes numériques qui implémente la FFT pour résoudre des problèmes de mécanique comme AMITEX_FFTP (Gélébart, s. d.), CraFT (Moulinec & Suquet, 1994) et DAMASK (Roters et al., 2019).

Dans ce travail, une méthode basée sur la FFT est employée pour résoudre les problèmes d'homogénéisation sous conditions aux limites périodiques avec l'aide du logiciel AMITEX_FFTP (Gélébart, s. d.).

2.3.2. Homogénéisation basée sur la Transformé de Fourier Rapide (FFT)

La méthode FFT est présentée à travers le cas d'un problème purement élastique, afin d'illustrer le principe de l'homogénéisation. Bien que le modèle utilisé pour les agrégats dans cette thèse soit élasto-viscoplastique, l'exposé suivant se limite au cadre élastique pour faciliter l'introduction de la méthode.

Soit un VER périodique de domaine Ω constitué d'un matériau hétérogène de rigidité, $\underline{\underline{\underline{\underline{C}}}}(x)$, et $\underline{\underline{E}}$ la déformation moyenne imposée. Le champ de déformations locales dans le repère global du VER est décomposé comme la somme de la déformation moyenne et d'un champ

de fluctuations périodique noté $\underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}(x)$. Les équations du problème s'écrivent donc dans le repère globale (x_g, y_g, z_g) de la façon suivante dans le cas des petites déformations

$$\begin{cases} \underline{\nabla}(\underline{\underline{\sigma}}(x)) = \underline{0} \\ \underline{\underline{\varepsilon}}(x) = \underline{\underline{E}} + \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}(x) \\ \underline{\underline{\sigma}}(x) = \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}}(x) : \underline{\underline{\varepsilon}}(x) \\ \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}(x) = \underline{\underline{\nabla}}^s(\underline{\tilde{u}}(x)) \\ \underline{\underline{\sigma}}(x).\underline{n}(x)\ anti-périodique \\ \underline{\tilde{u}}(x)\ périodique \end{cases} \quad (69)$$

où $\underline{\nabla}$ est l'opérateur divergence, $\underline{\underline{\sigma}}(x)$ la contrainte de Cauchy, $\underline{\underline{\varepsilon}}(x)$ la déformation locale, $\underline{n}(x)$ la normale au surface extérieure du domaine, $\underline{\tilde{u}}(x)$ le champ de déplacement associé à $\underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}(x)$ et $\underline{\underline{\nabla}}^s$ l'opérateur gradient symétrisé.

Pour résoudre ce problème d'élasticité hétérogène, l'équation de Lippmann–Schwinger (Lippmann & Schwinger, 1950) est utilisée. Moulinec et Suquet (Moulinec & Suquet, 1994) ont été les premiers à proposer une méthode de résolution basée sur ces équations. Leur approche consiste à transformer les équations en un problème intégral périodique de type Lippmann–Schwinger afin de déterminer le champ de déformation. Cette méthode utilise la transformée de Fourier discrète (DFT) pour effectuer la transformation des champs dans l'espace de Fourier, ainsi qu'un algorithme de point fixe pour résoudre de manière itérative l'équation implicite. Plusieurs chercheurs ont contribué à l'amélioration du taux de convergence avec des méthodes qui utilisent la descente par gradient (Bellis & Suquet, 2019; Kabel et al., 2014).

Pour cela, la loi de comportement est reformulée comme suit

$$\underline{\underline{\sigma}}(x) = \underline{\underline{\underline{\underline{C_0}}}} : \underline{\underline{\varepsilon}}(x) + \left(\underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} - \underline{\underline{\underline{\underline{C_0}}}}\right) : \left(\underline{\underline{E}} + \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}(x)\right) \quad (70)$$

où $\underline{\underline{\underline{\underline{C_0}}}}$ est la raideur moyenne pour l'ensemble du VER.

Le dernier terme de l'équation précédente correspond à un champ de polarisation. Il est donné par

$$\underline{\underline{\tau}}(x) = \left(\underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} - \underline{\underline{\underline{\underline{C_0}}}}\right) : \left(\underline{\underline{E}} + \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}(x)\right). \quad (71)$$

Le champ de déformation solution du problème ainsi posé (équation (69)) peut être déterminé par la résolution de l'équation de Lippmann–Schwinger suivante

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(x) = \underline{\underline{E}} - \left(\underline{\underline{\underline{\underline{\Gamma}}}}^0 * \underline{\underline{\tau}}\right)(x) \quad \forall x \in \Omega. \tag{72}$$

avec $\underline{\underline{\underline{\underline{\Gamma}}}}^0$ l'opérateur de Green et où *a*b* désigne le produit de convolution de *a* et *b*. Cette équation peut être récrite avantageusement dans l'espace de Fourrier où elle devient « locale » et ainsi plus simple à résoudre, comme suit

$$\begin{cases} \underline{\underline{\hat{\varepsilon}}}(\xi) = -\left(\underline{\underline{\underline{\underline{\widehat{\Gamma}}}}}^0(\xi) : \underline{\underline{\hat{\tau}}}(\xi)\right) \quad \forall \xi \neq 0 \\ \underline{\underline{\hat{\varepsilon}}}(0) = \underline{\underline{E}} \end{cases}, \tag{73}$$

où $\hat{a}$ désigne la transformée de Fourrier de a et ξ les vecteurs d'onde.

2.3.3. Schéma d'intégration implicite de la loi

Dans le cadre du calcul FFT, la résolution de l'équation de Lippmann–Schwinger fournit, à chaque pas de temps ou de chargement, le champ de déformation totale dans le domaine. Toutefois, pour chaque point matériel (ou voxel), il est nécessaire d'intégrer localement la loi de comportement afin de mettre à jour les variables internes et d'évaluer le tenseur des contraintes.

Afin de garantir la stabilité numérique et la robustesse de l'algorithme, en particulier dans le cas de la plasticité cristalline où le comportement est fortement non linéaire, un schéma d'intégration implicite est utilisé. Celui-ci repose sur le calcul simultané : de l'incrément de déformation élastique $\Delta\underline{\underline{\varepsilon_e}}$ et de l'incrément de glissement plastique $\Delta\gamma^s$ pour chaque système de glissement *s* entre deux instants de temps t et $t + \Delta t$. Les fonctions résidus $\underline{\underline{f_e}}$ et f_{γ^s} sont respectivement, obtenues à l'aide de la décomposition additive de la déformation. Ces fonctions sont données, dans le repère du cristal, par :

$$\begin{cases} \underline{\underline{f_e}} = \Delta\underline{\underline{\varepsilon_e}} - \Delta\underline{\underline{\varepsilon}} + \sum_{s=1}^{n^s} \Delta\gamma^s \underline{\underline{m^s}} \\ f_{\gamma^s} = \Delta\gamma^s - signe(\tau^s_{t+\Delta t} - x^s_{t+\Delta t})\Delta t \left\langle \frac{|\tau^s_{t+\Delta t} - x^s_{t+\Delta t}| - \tau^0}{K} \right\rangle^n \end{cases} \tag{74}$$

Les variables sont actualisées de la façon suivante :

$$\begin{cases} x^s_{t+\Delta t} = x^s_t + \dfrac{c\Delta\gamma^s - d x^s_t\,|\Delta\gamma^s|}{1 + d|\Delta\gamma^s|} \\ \underline{\underline{\sigma_{t+\Delta t}}} = \underline{\underline{\sigma_t}} + \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} : \Delta\underline{\underline{\varepsilon_e}} \end{cases} \tag{75}$$

La méthode implicite de Newton est utilisée pour résoudre le système. La matrice jacobienne J se met sous la forme suivante,

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial \underline{\underline{f_e}}}{\partial \Delta \underline{\underline{\varepsilon_e}}} & \cdots & \frac{\partial \underline{\underline{f_e}}}{\partial \Delta \gamma^j} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_{\gamma^s}}{\partial \Delta \underline{\underline{\varepsilon_e}}} & \cdots & \frac{\partial f_{\gamma^i}}{\partial \Delta \gamma^j} \end{bmatrix} \tag{76}$$

avec

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \underline{\underline{f_e}}}{\partial \Delta \underline{\underline{\varepsilon_e}}} = \underline{\underline{\underline{\underline{I}}}} \\ \dfrac{\partial \underline{\underline{f_e}}}{\partial \Delta \gamma^s} = \underline{\underline{m^s}} \\ \dfrac{\partial f_{\gamma^s}}{\partial \Delta \underline{\underline{\varepsilon_e}}} = -\Delta t \dfrac{n}{K} \left\langle \dfrac{|\tau^s_{t+\Delta t} - x^s_{t+\Delta t}| - \tau^0}{K} \right\rangle^{n-1} \underline{\underline{m^s}} : \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} \\ \dfrac{\partial f_{\gamma^i}}{\partial \Delta \gamma^j} = \begin{cases} 1 + \Delta t \dfrac{n}{K} \left\langle \dfrac{|\tau^i_{t+\Delta t} - x^i_{t+\Delta t}| - \tau^0}{K} \right\rangle^{n-1} \left(\dfrac{C - D x^i_t signe(\Delta \gamma^i)}{(1 + D \Delta \gamma^i signe(\Delta \gamma^i))^2} \right) si\ i = j \\ 0\ si\ i \neq j \end{cases} \end{cases} \tag{77}$$

L'actualisation des inconnues entre les incréments *k* et *k + 1* de la méthode de Newton est alors donnée par

$$\begin{bmatrix} \Delta \underline{\underline{\varepsilon_e}} \\ \vdots \\ \Delta \gamma^s \\ \vdots \end{bmatrix}_{k+1} = \begin{bmatrix} \Delta \underline{\underline{\varepsilon_e}} \\ \vdots \\ \Delta \gamma^s \\ \vdots \end{bmatrix}_k - J_k^{-1} \begin{bmatrix} \underline{\underline{f_e}} \\ \vdots \\ f_{\gamma^s} \\ \vdots \end{bmatrix}_k, \tag{78}$$

et celle de la dissipation est obtenue par

$$D_{t+\Delta t} = D_t + \sum_{s=1}^{n^s} [\Delta \gamma^s (\tau^s_{t+\Delta t} - x^s_{t+\Delta t}) + \frac{d}{c} (x^s_{t+\Delta t})^2 |\Delta \gamma^s|]. \tag{79}$$

2.4. Agrégat polycristallin : Chargement uniaxial de traction-compression

Dans cette section, après avoir étudié la génération des agrégats polycristallins ainsi que les lois de comportement de plasticité cristalline, les premiers résultats issus des simulations numériques sous un chargement uniaxial de traction-compression seront analysés. Dans un premier temps, l'étude des champs de contraintes globale et locale pour

deux amplitudes de 90 MPa et de 150 MPa sera menée. Dans un second temps, l'étude des facteurs d'influence comme le raffinement du maillage, l'influence du nombre de tirages et l'influence du nombre de grains sur la dissipation moyenne par cycle seront examinées. Finalement, l'étude des influences des paramètres élasto-viscoplastiques ainsi que les conditions limites seront discutés.

2.4.1. Comportement mésoscopique : évolution de la contrainte nominale

Il convient tout d'abord de définir les notations des tenseurs de contrainte et de déformation sur les trois échelles considérées : celle du VER, celle des grains et celle du voxel. Les tenseurs de contrainte et de déformation par voxel sont notés respectivement $\underline{\underline{\sigma}}_{voxel}$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}_{voxel}$. Pour les autres échelles, les tenseurs des contraintes exprimés dans le repère globale (x_g, y_g, z_g), sont définis par :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\sigma}}_{VER} = \dfrac{1}{V_{VER}} \displaystyle\int_{VER} \underline{\underline{\sigma}}_{voxel} dV = \underline{\underline{\Sigma}} \\ \underline{\underline{\sigma}}_{grain} = \dfrac{1}{V_{grain}} \displaystyle\int_{grain} \underline{\underline{\sigma}}_{voxel} dV \end{cases} \tag{80}$$

Après une étude de convergence du maillage, un nombre de 91 125 voxels a été sélectionné, ce qui correspond en moyenne à 146 voxels par grain. Ce choix est cohérent avec l'étude de la littérature menée par (Chen et al., 2022) qui indique qu'un nombre compris entre 20 et 100 éléments par grain est suffisant pour l'analyse de la déformation à l'échelle du grain.

Concernant les conditions aux limites, la périodicité a été utilisée sur toutes les faces du VER. Un chargement cyclique de traction-compression d'amplitude de chargement, Σ_0, de rapport de charge $R = \frac{\Sigma_{min}}{\Sigma_{max}} = -1$ ($\Sigma_{moy} = 0$) et de fréquence de chargement, f = 0,25 Hz a été appliqué dans la direction z, avec Σ_{min} la contrainte minimale appliquée, Σ_{max} la contrainte maximale appliquée et Σ_{moy} la contrainte moyenne appliquée. Deux niveaux d'amplitude des contraintes, Σ_0 ont été considérés : 90 MPa et 150 MPa. Dans le cadre de l'étude, 30 tirages d'orientations et de tessellations ont été réalisés.

La Figure 22(a) montre l'évolution de la contrainte nominale (Σ) en fonction de la déformation macroscopique pour le premier tirage d'orientation. Dans la Figure 22(b), toutes les autres composantes du tenseur des contraintes sont tracées pour Σ_0 de 90 MPa, un $\varepsilon_{zz,VER}$ d'environ 0,05 % est obtenue, ce qui correspond à un très faible niveau de déformation plastique à l'échelle macroscopique du VER. Ainsi, ce niveau se situe dans la plage d'amplitude de contrainte souhaitée, à savoir celui de la fatigue à grand nombre de cycles.

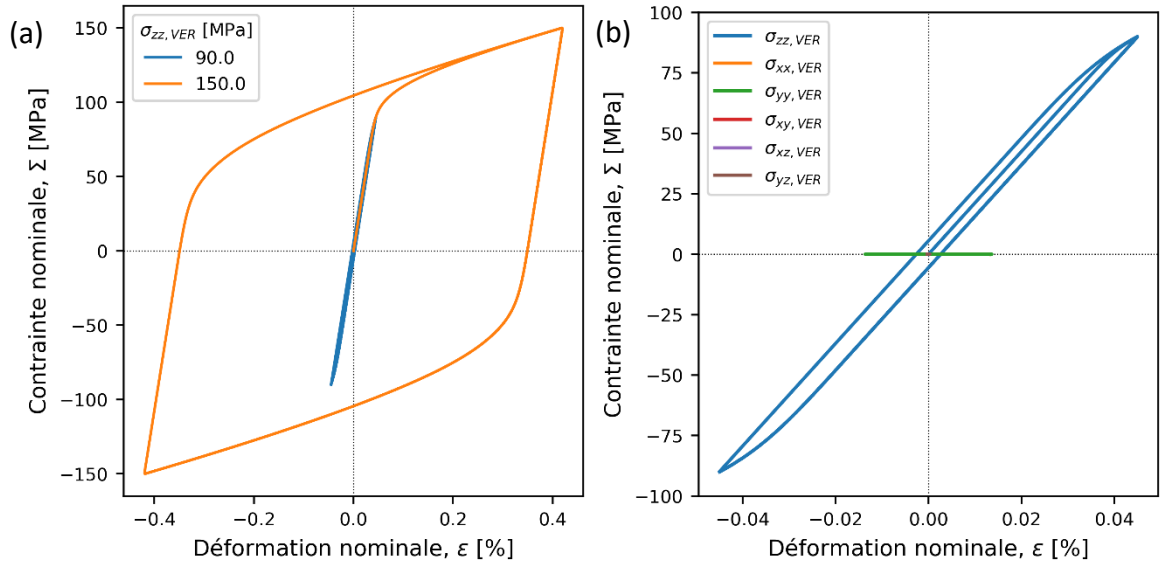


Figure 22.(a) Évolution de la contrainte nominale pour 1,5 cycles à 150 MPa et à 90 MPa et 1 tirage d'orientation. (b) Évolution de la contrainte nominale pour 90MPa et 1 tirage d'orientation. Chaque ligne représente une composante de contrainte du VER dans le repère global

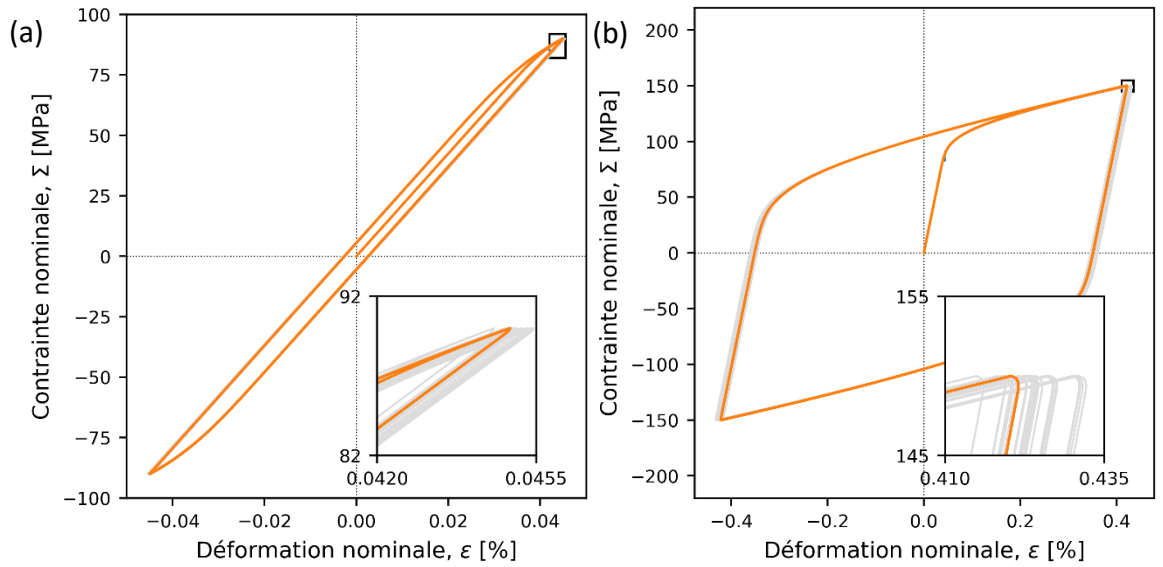


Figure 23. Évolution de la contrainte nominale pour 1,5 cycles à (a) 90MPa et à (b)150 MPa et 30 tirages d'orientation. La ligne orange représente l'évolution du dernier tirage d'orientation et les lignes en gris représentent les 29 premiers tirages d'orientation. Le module d'Young moyen $\tilde{E} = 211{,}90 \pm 0.6\ GPa$ est calculé entre 0,01% et 0,03% de déformation macroscopique

Dans la Figure 23(a,b), l'évolution de la contrainte nominale pour 30 tirages d'orientation est aussi tracée. Il est possible de voir qu'il y a une faible variation de la déformation pour chaque tirage. Le module de Young moyen, $\tilde{E}$, pour les 30 tirages a été estimé à $211{,}9 \pm 0{,}6\ GPa$ et le coefficient de Poisson, ν , à $0{,}289 \pm 0{,}001$ (calculé comme $\nu = -\frac{\varepsilon_{zz,VER}}{\frac{\varepsilon_{xx,VER}+\varepsilon_{yy,VER}}{2}}$). Dans la direction z, la limite d'élasticité à 0,2 % de déformation plastique macroscopique est estimé à $R_{p_{0,2}} = 133{,}23 \pm 0{,}35$ MPa. Dans la suite du travail,

l'ensemble des chargements macroscopiques étudiés ne pas dépassera pas 90 MPa ce qui permet de rester dans le domaine d'élasticité macroscopique.

Dans la Figure 24, l'hystérésis contrainte – déformation stabilisée pour les deux niveaux d'amplitude des contraintes étudiées est présentée. La réponse contrainte – déformation globale du volume élémentaire représentatif (VER) est tracée en ligne bleu, tandis que les valeurs de contrainte et de déformation, c'est-à-dire $\sigma_{zz,grain}$ et $\varepsilon_{zz,grain}$ sont représentées en orange. Cette représentation permet de mettre en évidence l'hétérogénéité des déformations et des contraintes locales à l'échelle du grain.

Pour la première plage de contrainte appliquée (90 MPa) dans la Figure 24(a), les déformations locales par grain restent relativement homogènes, avec des valeurs comprises entre 0,03 % et 0,06 % pour la déformation maximale appliquée (indiquée par les points en orange). Les contraintes associées varient de 65 à 110 MPa. En revanche, pour la deuxième plage de contrainte appliquée (150 MPa) dans la Figure 24(b), une hétérogénéité plus marquée des déformations locales est observée. Celles-ci s'étendent de 0,3 % à 0,6 %, ce qui correspond à une dispersion nettement plus importante que dans le premier cas. Les contraintes varient quant à elles entre 100 et 200 MPa.

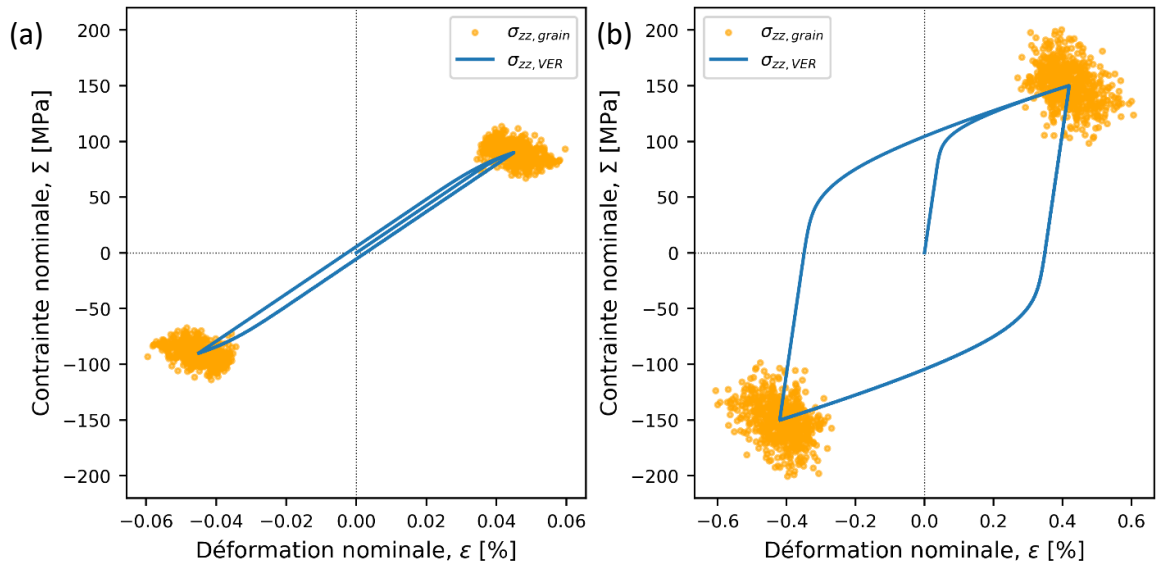


Figure 24. Courbe contrainte - déformation pour 1,5 cycles à (a) 150 MPa et à (b) 90 MPa. Les valeurs locales (points en orange) sont représentées aux niveaux de déformation maximal et minimale à la fin du 1er cycle.

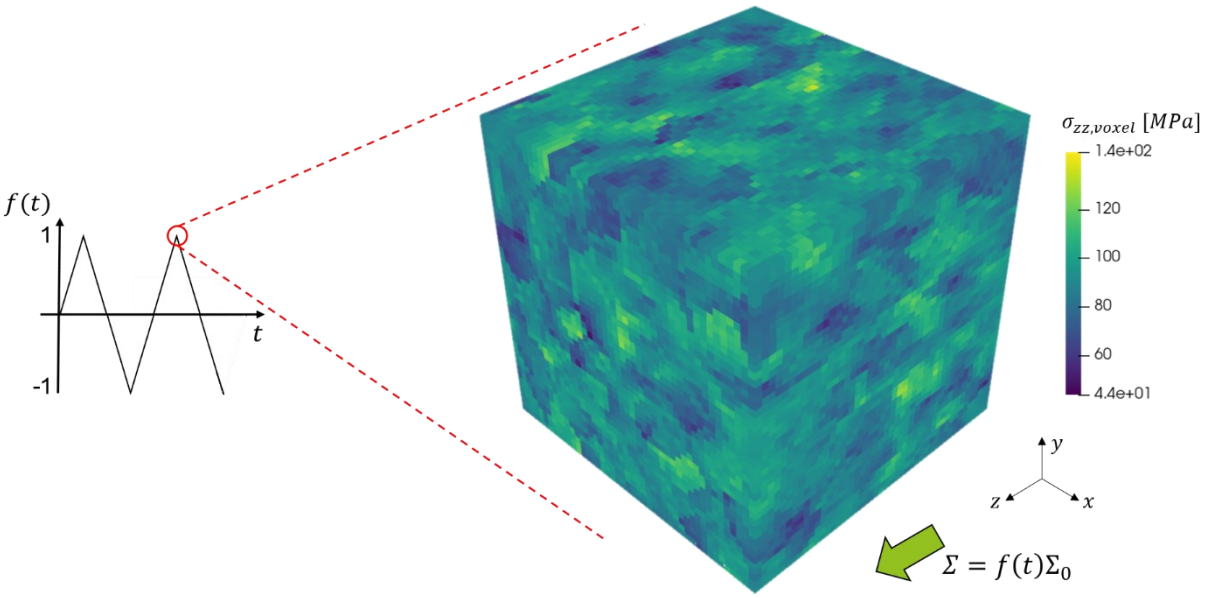


Figure 25. Distribution des états de contrainte, $\sigma_{zz,voxel}$ à la fin du premier cycle pour une amplitude de contrainte de 90 MPa

Cette comparaison met en évidence que l'augmentation de l'amplitude de la contrainte appliquée conduit à une accentuation de l'hétérogénéité locale, aussi bien en termes de déformation que de contrainte. Cela a été aussi constaté par (Boeff et al., 2017). En outre, il est possible aussi de regarder l'hétérogénéité des valeurs de contraintes $\sigma_{zz,voxel}$ dans l'ensemble de l'agrégat à la fin du premièr cycle comme le montre la Figure 25.

Dans la Figure 26, les valeurs de $\sigma_{zz,grain}$ et de $\varepsilon_{zz,grain}$ à la fin du premier cycle sont tracés en fonction du facteur de Schmid (*FS*) qui est défini comme

$$FS = cos(\theta)cos(\chi), \tag{81}$$

où χ est l'angle entre la force et la normale $\underline{n}$ au plan de glissement *s* et θ est l'angle entre la force appliquée et le plan de glissement. Le facteur de Schmid (FS) considéré est celui du système de glissement le plus plastifiant. Il est notable, selon la Figure 26(a), de voir l'hétérogénéité du champ de contrainte entre grains, un comportement qui confirme l'hétérogénéité des valeurs de contraintes par voxel illustrée dans la Figure 25. En outre, il est montré que la plupart des grains possèdent un système de glissement plus plastifiant avec des valeurs de facteur de Schmid comprise entre 0,475 et 0,5 et des valeurs de contrainte comprise entre 70 MPa et 110 MPa. Il est évident aussi qu'il y a des grains qui possèdent un facteur de Schmid bas et des états de contrainte plus élevés.

Dans la Figure 26(b), il est possible de constater une tendance similaire en ce qui concerne les déformations, à savoir une forte hétérogénéité : les déformations peuvent varier entre 0,035% à 0,06%.

L'hétérogénéité des valeurs vient de plusieurs facteurs comme par exemple l'influence du voisinage ou l'incompatibilité entre les grains lors du chargement. Ce sujet a été déjà

abordé plusieurs fois dans la littérature par Stopka, Castellucio et McDowell (Castelluccio & McDowell, 2015; Stopka et al., 2022).

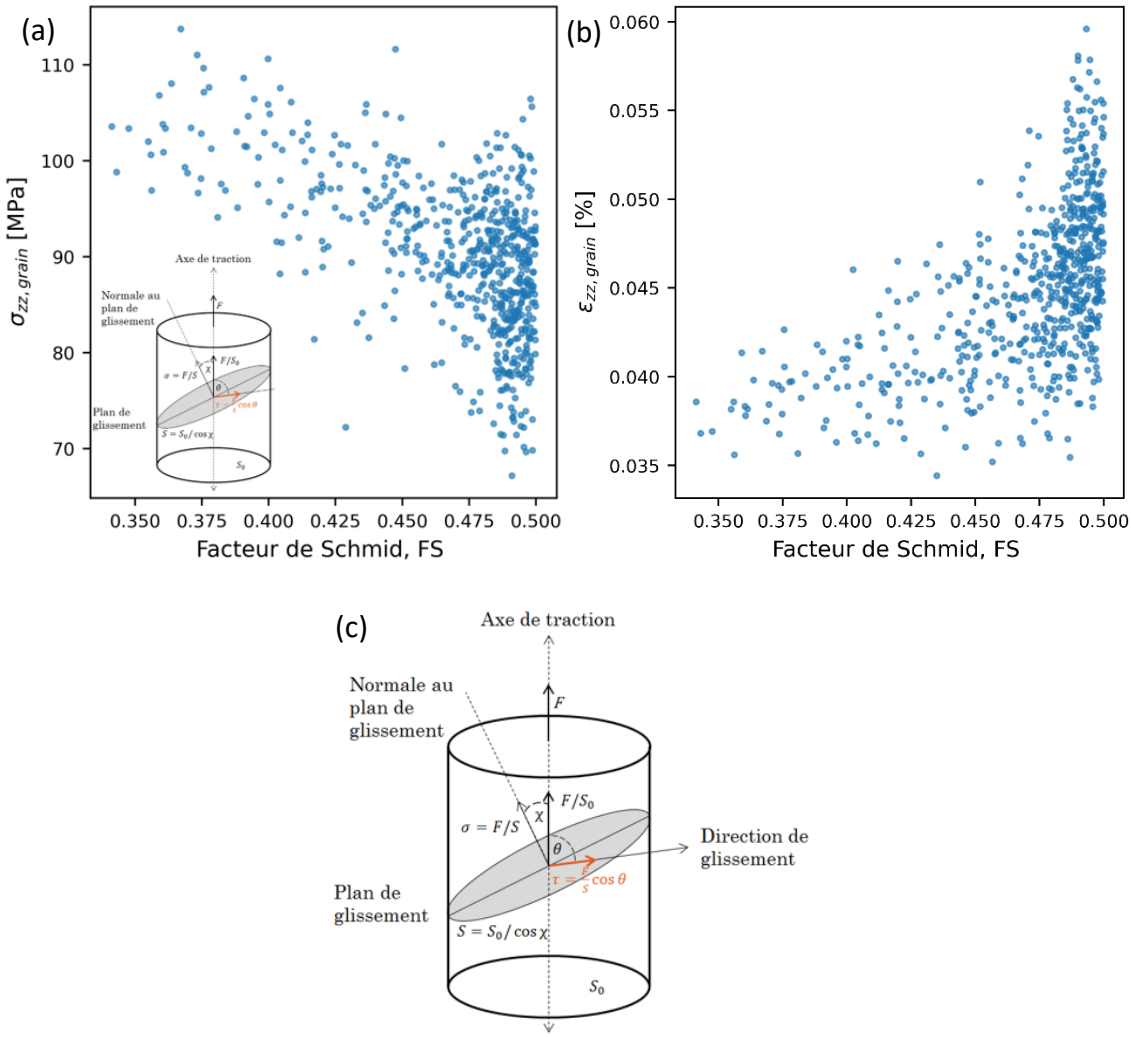


Figure 26. Évolution du facteur de Schmid (FS), (a) pour $\sigma_{zz,grain}$ et (b) $\varepsilon_{zz,voxel}$ dans la direction z à la fin du 1er cycle sous une amplitude de contrainte de 90 MPa (c) schéma d'un système de glissement

2.4.2. Influence du raffinement du maillage

Dans cette section, une analyse de la convergence au maillage en fonction du nombre de voxels pour représenter un agrégat polycristallin de 625 grains sera réalisée. Dans la Figure 27(a-c-e-g-i), cinq cas seront considérés. Les VERs vont avoir $23 \times 23 \times 23$ voxels, $45 \times 45 \times 45$ voxels, $90 \times 90 \times 90$ voxels, $135 \times 135 \times 135$ voxels et $180 \times 180 \times 180$ voxels. Une seule amplitude de contrainte a été considérée (90 MPa). Une attention particulière sera accordée à la dissipation étant donné les objectifs de ce travail.

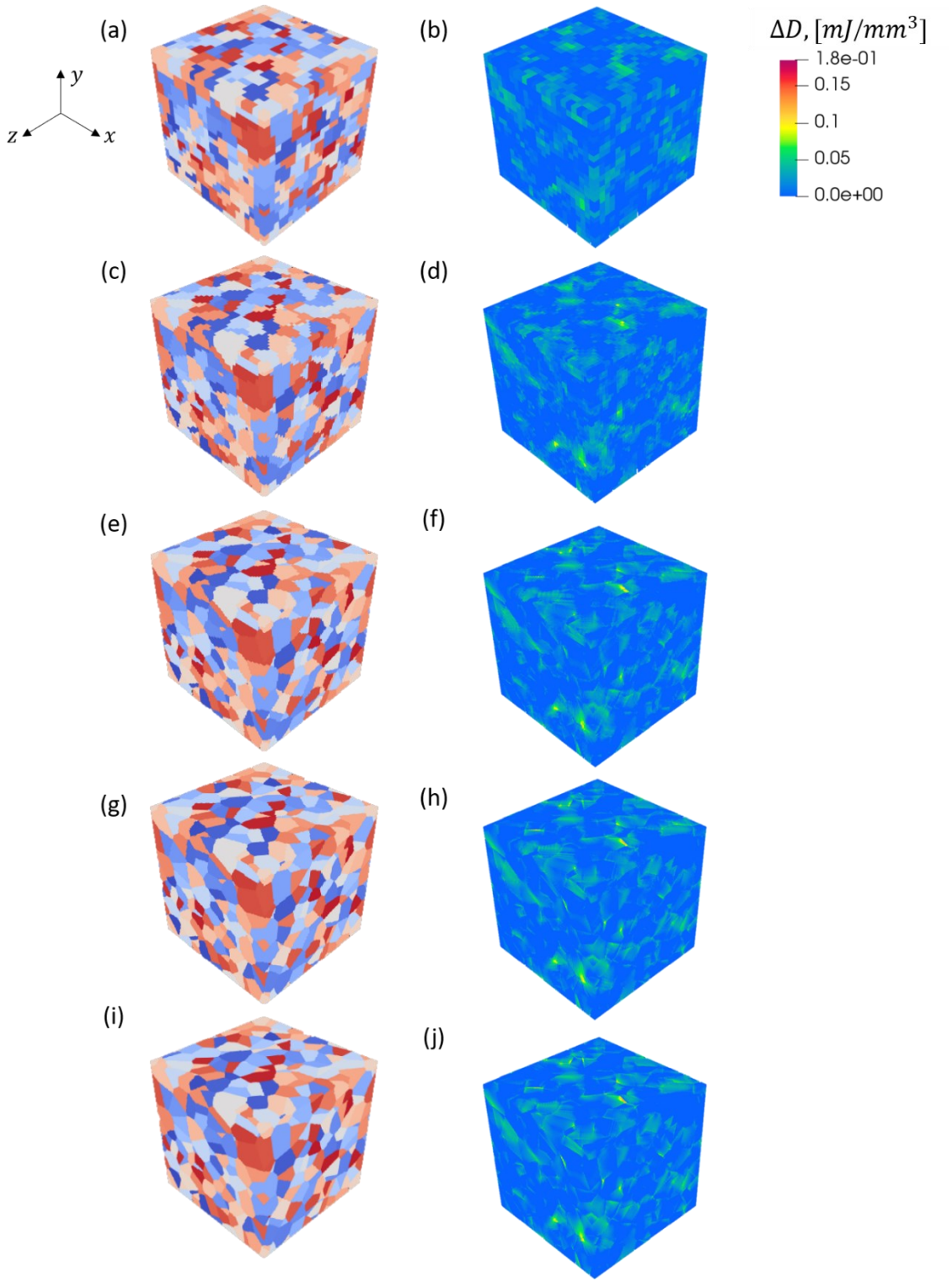


Figure 27. Différents VERs (a) $23 \times 23 \times 23$ *voxels, (c)* $45 \times 45 \times 45$ *voxels, (e)* $90 \times 90 \times 90$ *voxels, (g)* $135 \times 135 \times 135$ *voxels, (i)* $180 \times 180 \times 180$ *voxels.*

En outre, dans la Figure 27(b-d-f-h-j), il est possible aussi d'étudier les champs locaux de dissipation accumulés par voxel (ΔD), au cours d'un cycle, donnés par la formule suivante

$$\Delta D = \int_{cycle} \dot{D}\, dt. \qquad (82)$$

Il apparaît clairement qu'à mesure que le raffinement du maillage est réalisé, une meilleure résolution dans les champs de dissipation locaux est constatée.

Afin d'étudier l'influence du nombre de voxels sur la réponse locale, l'évolution des réponses locales en fonction du nombre de voxels a été analysée. La Figure 28 présente quatre courbes correspondant à l'évolution de $\sigma_{zz,grain}$ et $\varepsilon_{zz,grain}$ pour les grains les plus et les moins sollicités dans la direction *z*, à la fin du premier cycle. Ces évolutions dépendent très faiblement du nombre de voxels.

Un autre paramètre important est l'influence du maillage sur la réponse moyenne par grain. Dans la Figure 29(a-b) il est possible de voir l'hétérogénéité des valeurs de $\sigma_{zz,grain}$ et de $\varepsilon_{zz,grain}$ en fonction du volume de grain. Si le nombre de voxels est augmenté la dispersion des valeurs locales est quasi constante. De plus, la Figure 30 montre l'évolution de $\sigma_{zz,grain}$ en fonction du nombre de voxels pour une amplitude à 90 MPa, il est notable que la moyenne reste constante et que la dispersion des valeurs de $\sigma_{zz,grain}$ est faiblement dépendante du nombre de voxels.

Pour un tirage d'orientation donné et une amplitude de chargement fixée, la dissipation cyclique moyenne du VER, $\widetilde{D}$, a été calculée à partir de l'intégrale de l'équation (82) sur un cycle stabilisé, conduisant à l'équation suivante

$$\widetilde{D} = \frac{1}{V_{VER}} \int_{VER} \Delta D\, dv. \qquad (83)$$

Dans la Figure 31, il est clair que la dissipation moyenne par cycle, $\widetilde{D}$, est peu sensible au degré de raffinement du maillage. Un comportement similaire a été constaté pour l'évolution de la contrainte macroscopique globale par (Barbe, 2000). Toutefois, dans le cadre de cette étude, l'intérêt ne réside pas uniquement dans la valeur moyenne de la dissipation, mais également dans la capacité du maillage à représenter de manière fidèle les champs locaux de dissipation, en particulier leur hétérogénéité. Pour cette raison, un compromis a été retenu, avec un maillage comportant 91125 ($45 \times 45 \times 45$) voxels , offrant un bon équilibre entre précision locale et coût numérique.

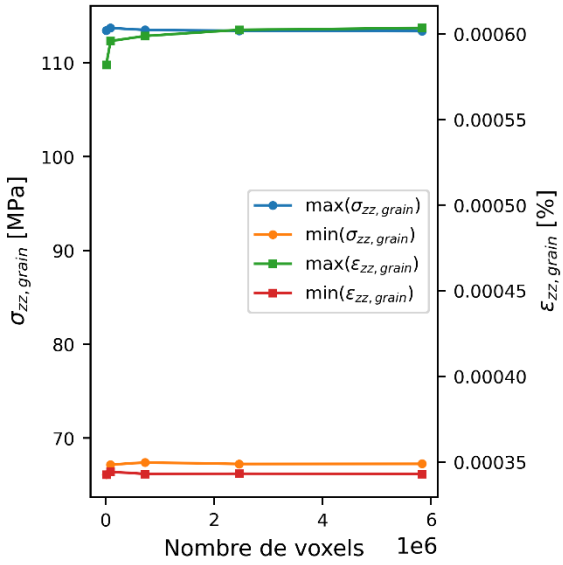


Figure 28. Évolution de $\sigma_{zz,grain}$ et $\varepsilon_{zz,grain}$ en fonction du nombre de voxels pour le grain le plus / le moins chargé dans la direction z à la fin du premier cycle

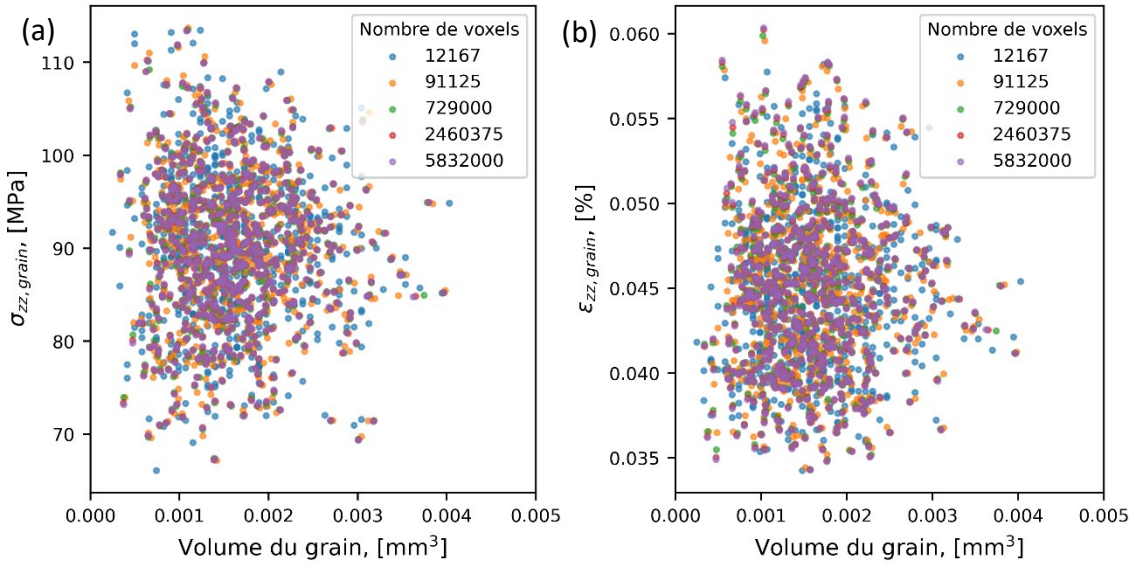


Figure 29.(a) $\sigma_{zz,grain}$ et (b) $\varepsilon_{zz,grain}$ en fonction du volume de grain pour différentes densités de voxels dans le VER de l'agrégat polycristallin

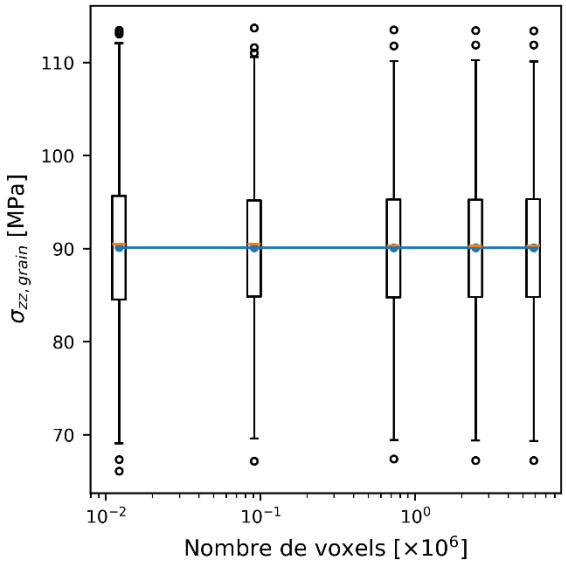


Figure 30. Évolution de $\sigma_{zz,grain}$ en fonction du nombre de voxels pour 625 grains à la fin du premier cycle. L'évolution en points pleins représente $\sigma_{zz,grain}$. Pour chaque box-plot, le point en bleu représente la moyenne et la ligne orange la médiane

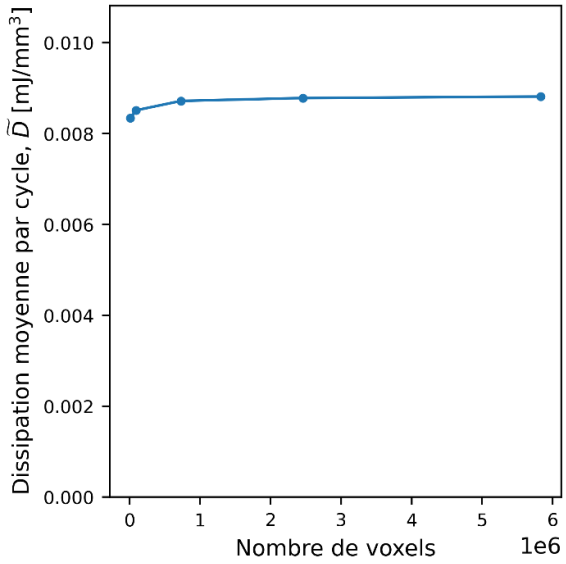


Figure 31. Évolution de la dissipation moyenne par cycle en fonction du nombre de voxels.

2.4.3. Influence du nombre de tirages des orientations sur la dissipation moyenne par cycle

Dans cette section, l'influence du nombre de tirages des orientations sur la dissipation moyenne par cycle a été étudiée pour une amplitude de contrainte de 90 MPa. La Figure 32 montre que la dispersion des valeurs reste constante lorsque le nombre de tirages augmente

de 15 à 90. Par conséquent, pour les calculs effectués, le nombre de tirages a été fixé à 30, afin de garantir un bon compromis entre précision et coût numérique.

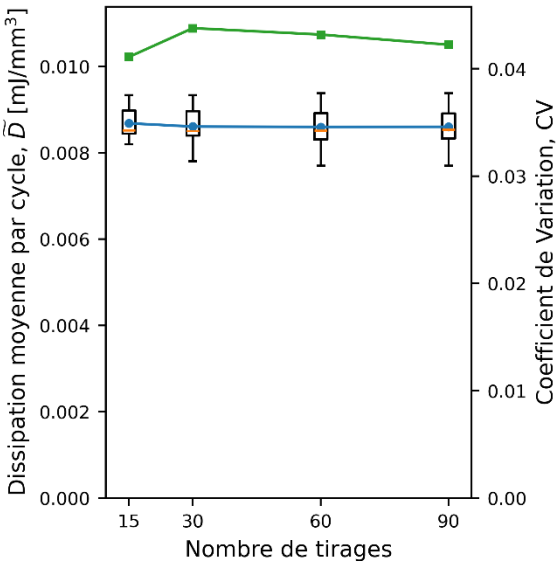


Figure 32. Évolution de la dissipation moyenne par cycle à 90 MPa pour 625 grains et du coefficient de variation. L´évolution en points pleins représente la dissipation. Pour chaque box-plot, le point en bleu représente la moyenne et la ligne orange la médiane. L'évolution du coefficient de variation est donnée par les points en carré en vert

2.4.4. Influence du nombre de grain sur la dissipation moyenne par cycle

Dans cette partie, l'influence du nombre de grains sur la réponse en dissipation de l'agrégat polycristallin est étudiée. Comme illustré sur la Figure 33(a-g), 30 tirages de tessellations et d'orientations ont été réalisés pour chaque variation du nombre de grains de l'agrégat. Le nombre de voxels par arête de chaque VER a été ajusté de sorte à conserver, en moyenne, environ 146 voxels par grain, comme indiqué dans le Tableau 2.

Dans la Figure 34 l'évolution de la dissipation en fonction du nombre de grains est tracée pour 90 MPa. Il est clair que plus le nombre de grains augmente, plus la dispersion des valeurs de dissipation diminue. En outre, la taille de grain moyenne a évolué pour chaque cas, mais avec la loi de comportement étudiée, il n'y a pas d'ingrédients ajoutés pouvant induire une dépendance à ce paramètre. Une stabilisation est notée à partir de 512 grains. Le choix de 625 grains correspond ainsi à un compromis entre les résultats présentés dans les Figure 31 et Figure 34 et le coût numérique associé aux simulations. Dans notre cas notre VER aura 625 grains avec en moyenne 146 voxels par grain. En revanche 30 tirages d'orientations seront réalisés lorsque la mise en avant des hétérogénéités locales sera souhaitée.

Nombre de VER	Nombre de grains	Nombre de voxels par arête	Nombre de voxels	Nombre de voxels moyen par grain
30	216	32	31 493	146
	343	37	50 009	
	512	42	74 650	
	625	45	91 125	
	729	47	106 288	
	1000	53	145 800	
	1331	58	194 060	

Tableau 2. Paramètres pour l'étude de l'influence du nombre de grains

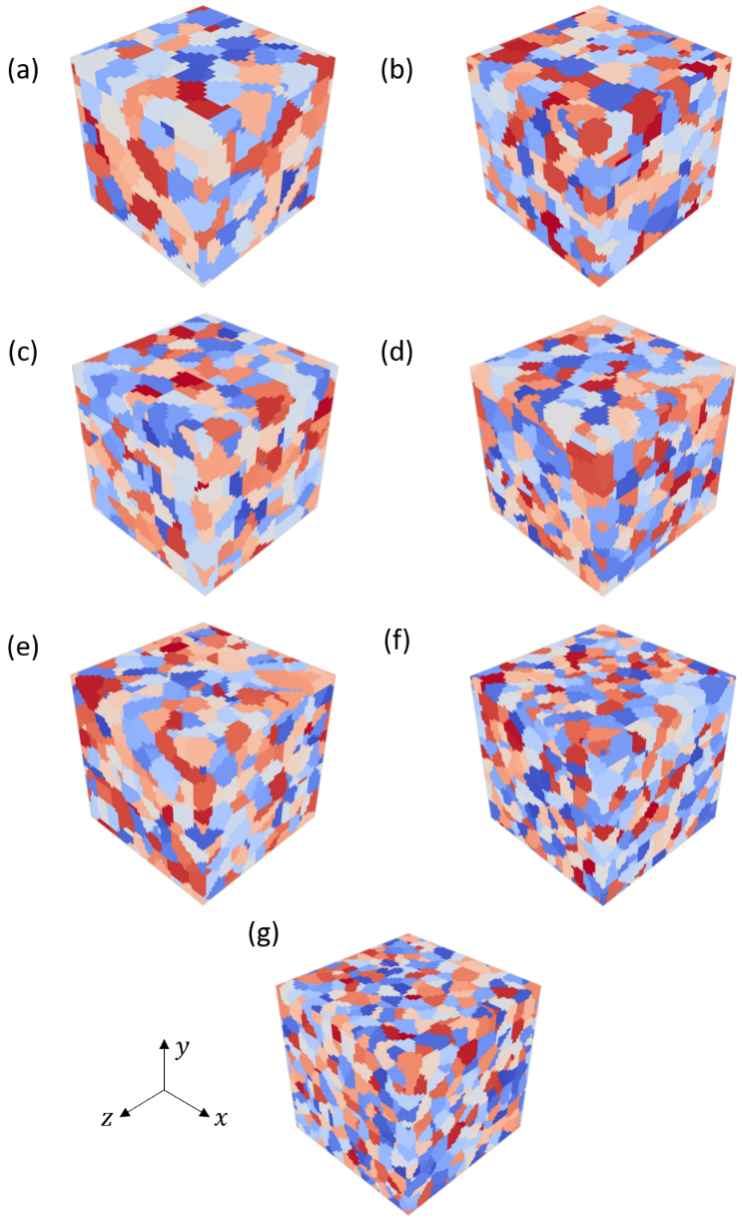


Figure 33. Agrégat polycristallin avec des nombres de grains variables entre (a) 216 grains, (b) 343 grains, (c) 512 grains, (d) 625 grains, (e) 729 grains, (f) 1000 grains et (g) 1331 grains pour un tirage d'orientation

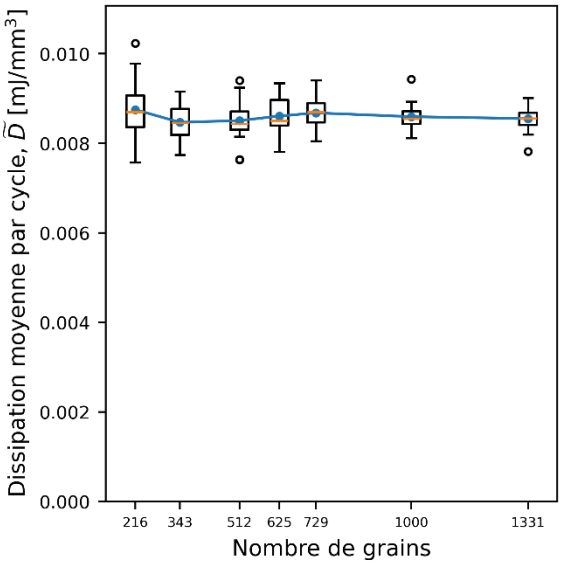


Figure 34. Évolution de la dissipation moyenne par cycle en fonction du nombre de grains à 90 MPa pour 30 tirages d'orientation. Pour chaque box-plot, le point en bleu représente la moyenne et la ligne orange la médiane.

2.4.5. Influence des paramètres de la loi de comportement

Une analyse a été menée afin d'étudier l'influence des paramètres élasto-viscoplastiques K et n de la loi de comportement utilisée. Il convient de rappeler qu'une faible dépendance est souhaitée. Pour cela, la fréquence de chargement a été modifiée, variant de f = 0,0025 Hz à f = 25 Hz, et l'évolution de la dissipation moyenne par cycle a été analysée à une amplitude de contrainte de 90 MPa, pour un tirage d'orientation donné.

Comme le montre la Figure 35(a-b), la fréquence de sollicitation a une influence négligeable sur le comportement macroscopique et la dissipation, ce qui suggère une faible sensibilité du modèle vis-à-vis de ce paramètre dans la gamme de fréquence et pour le rapport de charge étudié, comme souhaité. De plus, l'effet du nombre de cycles a été aussi analysé pour la fréquence f = 0,25 Hz. Comme montre la Figure 36, après avoir réalisé 20 cycles, il est notable que la boucle d'hystérésis soit déjà stable dès le premier cycle. Dans la suite de l'étude la fréquence de chargement sera de f = 0,25 Hz.

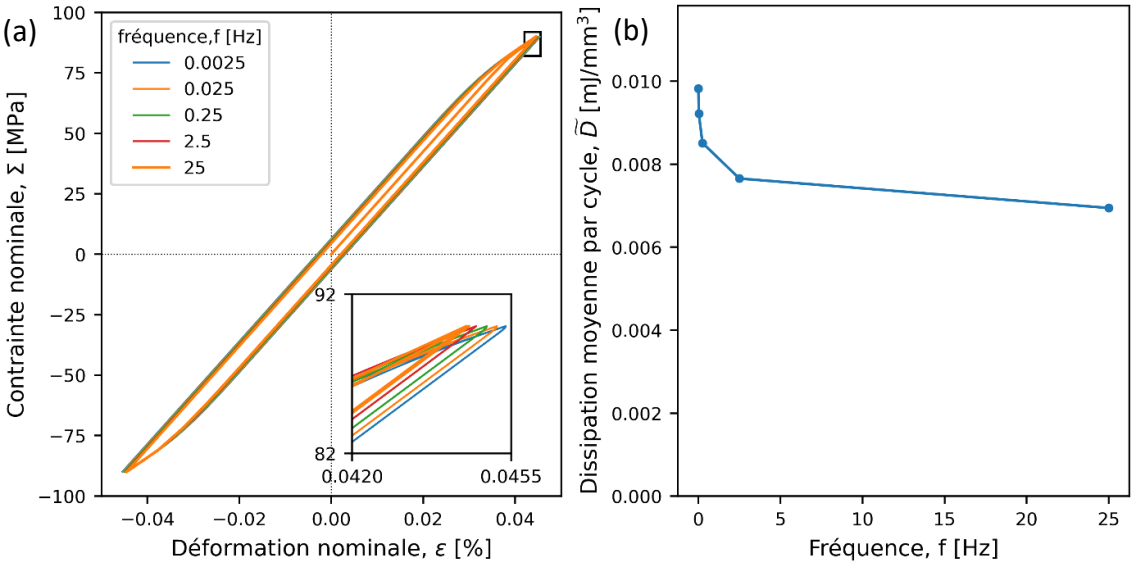


Figure 35. (a) Évolution de la courbe d'hystérésis de contrainte - déformation et (b) l'évolution de la dissipation moyenne par cycle pour des fréquences f de 0,025 Hz à 2,5 Hz à 90 MPa

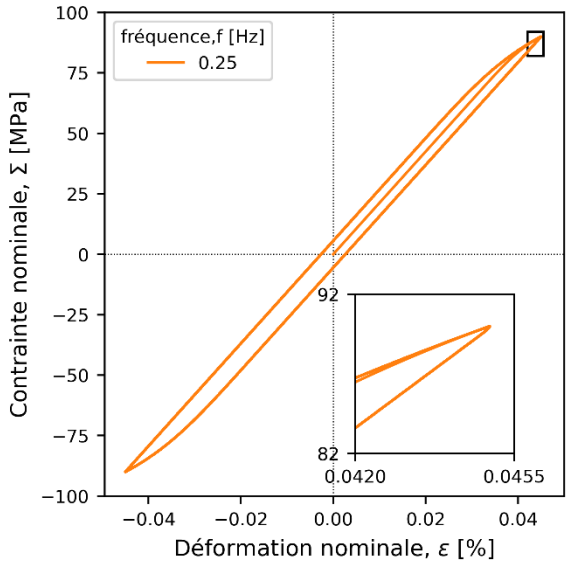


Figure 36. Évolution de la courbe d'hystérésis de contrainte - déformation pour 20 cycles à f = 0,25 Hz.

2.4.6. Influence des conditions limites

Jusqu'à présent, les conditions aux limites appliquées au VER étaient de type périodique sur toutes les surfaces, comme présenté dans la section 2.4.1. Inspiré par plusieurs études ayant exploré l'utilisation de conditions non périodiques sur certaines surfaces afin de mieux représenter les configurations expérimentales (Gélébart, 2021; Stopka et al., 2021), une modification des conditions aux limites de l'agrégat polycristallin a été mise en œuvre dans le cadre de ce travail.

En effet, lors des essais d'auto-échauffement à l'échelle expérimentale, les champs de température et de dissipation sont observés sur les surfaces libres des éprouvettes. Il est généralement admis que, pour la majorité des matériaux métalliques, ces observations en surface sont représentatives du comportement à cœur. Toutefois, afin de comprendre l'effet de cette configuration expérimentale, des simulations en plasticité cristalline ont été réalisées à partir d'un VER soumis à des conditions aux limites avec la présence de surfaces libres.

Les conditions de périodicité sont intrinsèques aux simulations numériques utilisant la méthode basée sur la FFT, certaines adaptations sont donc nécessaires pour intégrer les effets de surfaces libres. La stratégie adoptée dans cette étude consiste à ajouter, sur les surfaces extérieures qui ne sont pas dans la direction de sollicitation, des couches de voxels simulant le vide. L'épaisseur de ces couches a déjà fait l'objet de discussions dans la littérature, notamment dans les travaux de (Gélébart, 2021).

Dans le présent travail, une épaisseur de vide correspondant à un voxel a été ajoutée dans les plans *xz* et *yz* du VER. La Figure 37 illustre une comparaison des composantes de contrainte dans les trois directions à l'échelle du voxel, pour la modélisation avec conditions périodiques et celle avec surfaces libres. Le champ de contrainte dans la direction *z* présente une faible variation entre les deux approches. En revanche, les champs de contrainte dans les directions *x* et *y* montrent des différences notables dans les plans *yz* et *xz*, respectivement, en accord avec la modification des conditions aux limites.

Ensuite, le comportement macroscopique a été tracé comme le montre la Figure 38. Il apparaît qu'avec la modélisation incluant des surfaces libres, une légère augmentation de la déformation est observée.

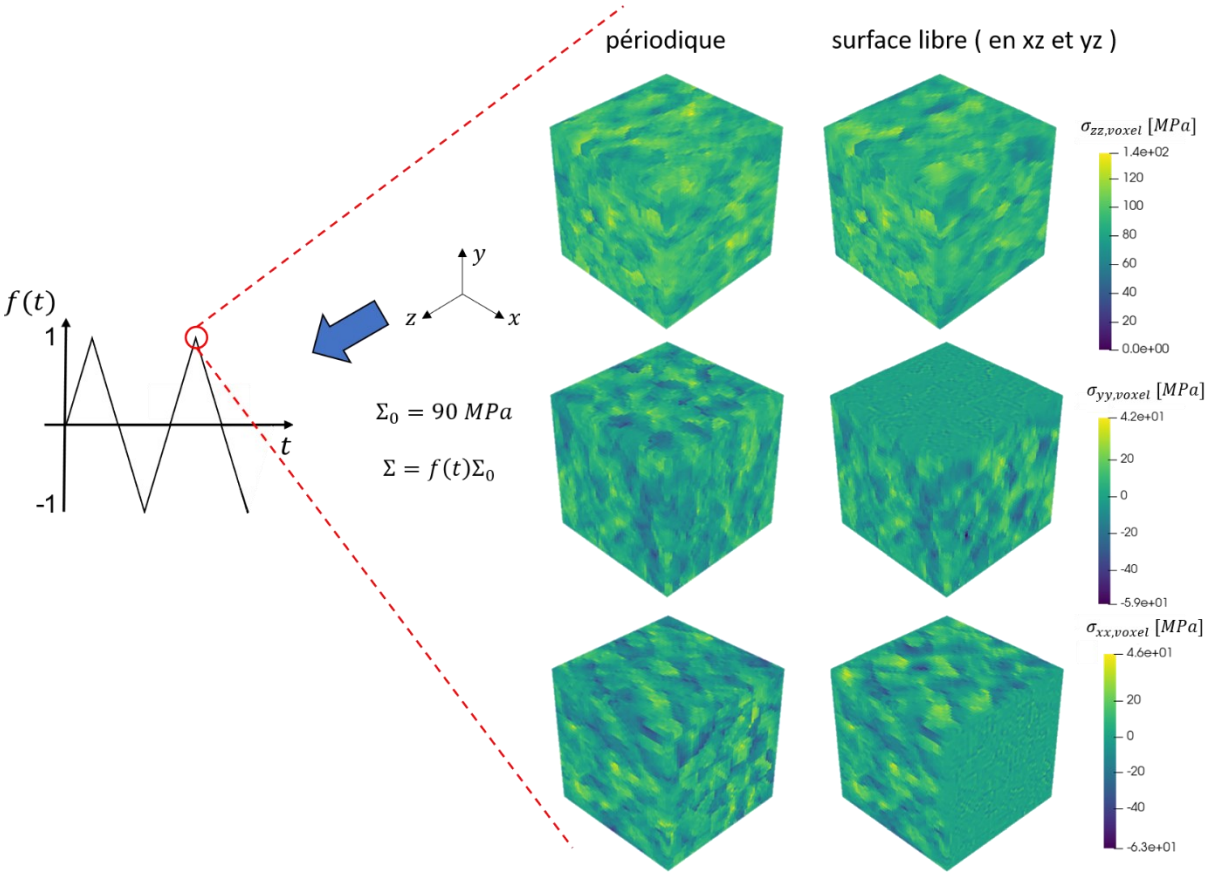


Figure 37. Champs de contrainte à l'échelle du voxel pour la modélisation périodique et périodique avec surfaces libres à la fin du premier cycle

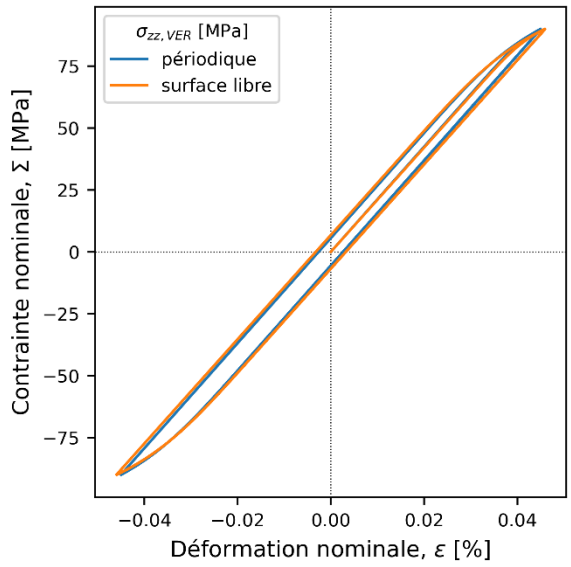


Figure 38. Évolution de la courbe hystérésis contrainte-déformation pour le cas avec les conditions limites périodiques et avec la surface libre

Le cœur de cette étude repose également sur l'analyse de la dissipation intrinsèque du matériau. La Figure 39 montre que, dans le cas avec surfaces libres, un plus grand nombre de

points (voxels en jaune et rouge) présentent des valeurs de dissipation plus élevées que dans le cas de la modélisation avec conditions périodiques.

En ce qui concerne la dissipation moyenne par cycle au sein du VER, une différence significative apparaît entre les deux approches : avec la modélisation périodique, la dissipation moyenne est de $\widetilde{D} = 0{,}0085\ mJ/mm^3$, tandis qu'avec la modélisation incluant des surfaces libres, elle atteint $\widetilde{D} = 0{,}0096\ mJ/mm^3$.

Cette différence s'explique par le fait que les surfaces libres favorisent la localisation du glissement plastique, ce qui intensifie la dissipation intrinsèque locale et conduit à peu de modification de la dissipation moyenne. Par la suite de l'étude, pour des raisons de commodité, des conditions uniquement périodiques seront utilisés.

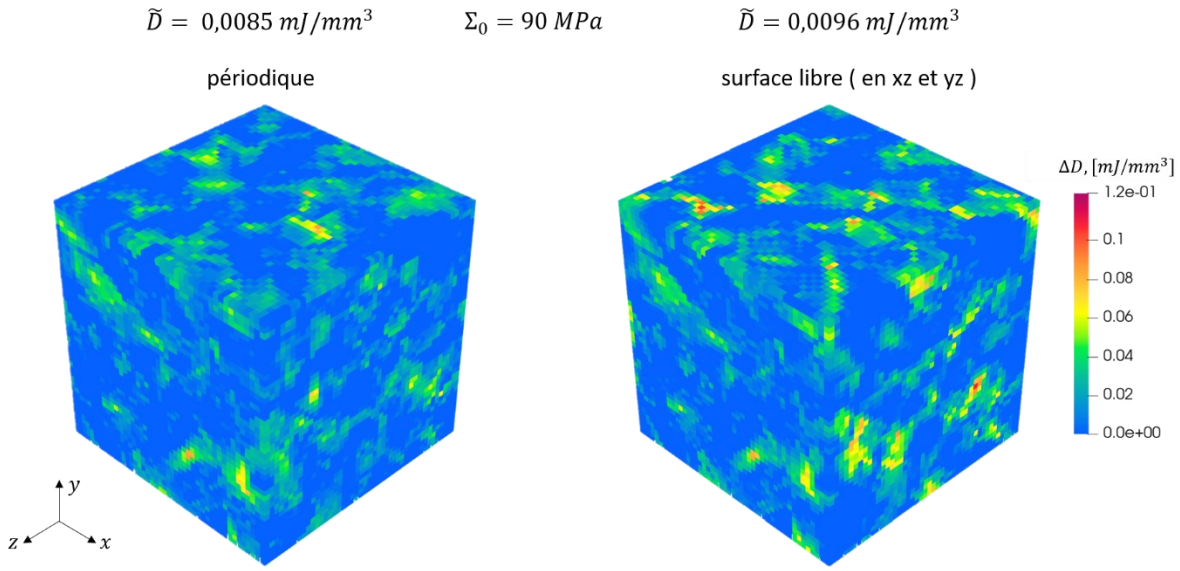


Figure 39. Comparaison de la dissipation accumulée dans un cycle pour le cas périodique et le cas avec les surfaces libres

2.5. Conclusion

Ce chapitre avait pour objet de présenter l'agrégat polycristallin qui va servir aux études menées dans les trois prochains chapitres, et de justifier certains choix le concernant comme la méthode d'obtention, le nombre de grains ou les méthodes numériques.

L'agrégat polycristallin considéré dans l'étude a été généré à l'aide du logiciel de microstructure Neper. Plusieurs aspects ont été détaillés, tels que la génération d'une tessellation de Voronoï, la distribution des orientations correspondant à une texture faible, ainsi que la distribution des volumes de grains qui est peu dispersée. Un modèle de plasticité cristalline basée sur une loi de comportement de type Méric–Cailletaud a été considéré. Une attention particulière a été portée au calcul de la dissipation intrinsèque étant donné le sujet de l'étude. Enfin, pour réaliser les différentes simulations numériques de chargements

cycliques appliqués à l'agrégat, une approche d'homogénéisation numérique basées sur la Transformée de Fourier Rapide (FFT) par le logiciel AMITEX_FFTP a été utilisée.

L'étude du comportement de l'agrégat polycristallin soumis à un chargement cyclique de faible amplitude a permis de mettre en évidence l'importance de certains facteurs d'influence sur les champs de contrainte et sur la dissipation intrinsèque :

1. A partir de résultats numériques obtenus pour un agrégat polycristallin constitué de 625 grains et 30 tirages des orientations :
   - L'évolution de la contrainte nominale est faiblement dépendante du tirage d'orientation pour une amplitude fixée à 90 MPa,
   - Il peut être noté l'existence d'une dispersion significative de la contrainte locale par grain, pas forcément liée au facteur de Schmid ;
2. Une étude de sensibilité a permis d'identifier les points suivants :
   - La dissipation moyenne par cycle est peu sensible au raffinement du maillage, mais celui-ci influence fortement les champs de dissipation locaux à l'échelle des grains,
   - Un nombre de 625 grains est suffisant pour modéliser correctement l'évolution de la dissipation moyenne par cycle,
   - Un nombre de 625 grains et 30 tirages d'orientations permet d'obtenir une meilleure distribution des réponses locales de l'agrégat polycristallin,
   - Le choix des paramètres élasto-viscoplastiques $K = 11, n = 2$ a été retenu afin de rendre la réponse du matériau peu dépendante de la vitesse de chargement,
   - La présence de surface libres provoque une légère augmentation de la dissipation locale au sein de l'agrégat, tandis que la dissipation moyenne est faiblement affectée,
   - Pour les paramètres matériau considérés et la direction de sollicitation *z* un $R_{p_{0,2}} = 133{,}23 \pm 0{,}35$ MPa a été estimé. Ainsi l'amplitude des contraintes sera bornée à 90 MPa dans la suite de l'étude pour rester dans le domaine d'élasticité macroscopique.

Chapitre 3 : Étude de la dissipation cyclique d'un agrégat polycristallin

Sommaire

Introduction 76
3.1. Agrégat polycristallin soumis à un chargement uniaxial de traction-compression 77
3.1.1. Apparition progressive de la microplasticité 77
3.1.2. Influence du tirage des orientations sur l'activation du glissement plastique 84
3.1.3. Évolution de la dissipation intrinsèque moyenne par cycle 86
3.2. Influence de l'anisotropie élastique et de l'écrouissage cinématique linéaire sur le comportement mécanique des matériaux 90
3.2.1. Influence de l'anisotropie élastique 90
3.2.2. Influence du paramètre de l'écrouissage cinématique linéaire ($\boldsymbol{c}$) 92
3.3. Construction d'une surface d'iso-dissipation 93
3.3.2. Conclusion Intermédiaire 97
3.4. Indicateurs de Fatigue (FIP) 98
3.4.1. Introduction bibliographique 99
3.4.2. FIP basée sur le glissement cumulé ($\Delta\boldsymbol{\nu}$) 100
3.4.3. Évolution du glissement plastique par voxel 100
3.4.4. Évolution du glissement plastique par grain 103
3.4.5. Distribution statistique du FIP 105
3.5. Conclusion 108

Introduction

Dans le chapitre précédent, des outils pour l'étude du comportement mécanique d'un agrégat polycristallin soumis à un chargement cyclique de faible amplitude ont été mis en place. Il est apparu que la microstructure joue un rôle essentiel dans la répartition des champs de contrainte et de la dissipation intrinsèque. De plus, la capacité du modèle micromécanique développé à décrire des phénomènes locaux associés à la plasticité cyclique, tout en identifiant les paramètres les plus importants, tels que la taille du volume élémentaire représentatif, le nombre de grains et le nombre de tirages d'orientation et de tessellations pour obtenir un VER, a été validé.

Dans la continuité du chapitre précédent, le chapitre 3 est consacré à l'étude de l'évolution de la dissipation intrinsèque et de la microplasticité sur une gamme d'amplitudes de contrainte inférieure à la limite d'élasticité apparente de l'agrégat. L'évolution de la dissipation en fonction de l'amplitude du chargement est étudiée afin d'établir un lien entre la dissipation obtenue par simulation numérique et les mesures d'auto-échauffement. L'objectif est d'analyser, d'une part, l'apparition progressive de la microplasticité pour essayer d'établir un dialogue entre le modèle probabiliste à deux échelles et le modèle du polycristal, et d'autre part, de proposer un critère de fatigue dans le cadre de notre étude numérique afin de retrouver le lien entre la dispersion et les courbes d'auto-échauffement qui est décrit par le modèle probabiliste à deux échelles. Ce critère vise à relier les mécanismes de dissipation aux paramètres susceptibles de prévoir l'amorçage des fissures.

D'une façon plus détaillée, le chapitre 3 est organisé comme suit en trois grandes parties :

- Première partie : l'apparition progressive de la microplasticité est analysée au sein de l'agrégat polycristallin. Une réflexion est menée sur la zone à considérer pour identifier un site actif de plasticité, ainsi que sur l'influence du tirage d'orientation et du seuil de plasticité. Cette étude permet de mieux comprendre la localisation de l'activité plastique à l'échelle microscopique et d'établir une analyse critique des hypothèses adoptées dans le modèle probabiliste à deux échelles. Il est précisé dès ce stade qu'aucun régime primaire ne sera observé dans les chapitres 3 et 4, en raison d'une limite d'élasticité trop élevée et de l'utilisation d'un unique écrouissage cinématique linéaire. Cela fera l'objet du chapitre 5.
- Deuxième partie : la dissipation moyenne par cycle est étudiée pour différentes amplitudes de chargement et plusieurs tirages d'orientation. L'influence de plusieurs facteurs, tels que l'anisotropie élastique, le paramètre d'écrouissage cinématique linéaire et la multi-axialité du chargement (traction – torsion), est examinée à partir de la construction de surfaces d'iso-dissipation (Guellec, 2023).

- Troisième partie : la fatigue est abordée à travers un critère basé sur le glissement plastique accumulé par chaque voxel et par chaque grain. Les corrélations possibles avec les courbes d'auto-échauffement sont également discutées.

3.1. Agrégat polycristallin soumis à un chargement uniaxial de traction-compression

Dans cette section, l'agrégat polycristallin est soumis à différentes amplitudes de contrainte afin d'étudier l'apparition progressive de la microplasticité ainsi que l'évolution de la dissipation moyenne par cycle.

3.1.1. Apparition progressive de la microplasticité

Comme discuté dans le chapitre 1 (sous-section 1.2.5), la microplasticité est un phénomène présent dans les alliages métalliques lorsqu'ils sont soumis à des chargements cycliques de faible amplitude. Munier et Amini (Amini, 2021; Munier, 2012), par exemple, ont observé que cette microplasticité se manifeste par l'apparition de bandes de glissement persistantes (BGPs) sur les surfaces des alliages métalliques au cours de chargements cycliques sur la plage des amplitudes des contraintes où le deuxième régime de la courbe d'auto-échauffement est présent.

En s'inspirant de ces observations expérimentales, des simulations de plasticité cristalline pour différentes amplitudes de chargement ont été menées sur cette plage. L'objectif principal de ces études est d'analyser l'évolution de l'apparition de la microplasticité, puis de la dissipation, en fonction de l'amplitude des contraintes. La question centrale porte sur le mode d'apparition de la microplasticité : se manifeste-t-elle de manière diffuse, sous forme de zones localisées, ou par une combinaison des deux ?

Ensuite, il sera question d'établir un lien, si cela est possible, avec le modèle probabiliste à deux échelles présenté au chapitre 1 (Doudard et al., 2005). Contrairement à ce modèle, qui considérait un VER constitué d'une matrice et d'une population de sites ponctuels activables, le cas de l'agrégat polycristallin étudié ici repose sur un volume représentatif élémentaire (VER) composé de plusieurs grains avec des formes et des tailles différentes.

Comme énoncé au chapitre 2, en raison de la nature de la loi de comportement considérée, caractérisée par une limite d'élasticité relativement importante et un écrouissage cinématique linéaire unique, la comparaison entre les simulations numériques et le modèle probabiliste à deux échelles concernera uniquement le régime secondaire. Ainsi, il est important de mener une réflexion sur la nature et la signification des sites du P.P.P. dans le cas de l'agrégat polycristallin. En effet, ils pourraient être associés soit aux voxels, soit aux grains. Une fois ce point clarifié, il conviendra de déterminer si l'évolution du nombre de sites

activés peut être reliée à celle de la dissipation moyenne par cycle de manière analogue à ce qui est observé dans le modèle probabiliste à deux échelles.

3.1.1.1. Glissement plastique cumulé par voxel

Lorsque le VER est soumis à plusieurs amplitudes de chargement, une microplasticité apparait progressivement au sein de l'agrégat. Pour déterminer dans quels voxels cette microplasticité, caractérisée par le glissement plastique, se manifeste, une variable binaire, $\delta(x)$, est considérée. Cette variable analyse l'évolution cumulée du glissement plastique Δv_{voxel} sur un cycle complet dans chaque voxel du maillage en fonction d'un seuil critique ($seuil_{voxel}$) donné par

$$\delta(x) = \begin{cases} 1, & si\ \Delta v_{voxel} \geq seuil_{voxel}\ (voxel\ plastifié) \\ 0, & si\ \Delta v_{voxel} < seuil_{voxel}\ (voxel\ élastique) \end{cases}, \quad (84)$$

avec

$$\Delta v_{voxel} = \int_{cycle} \sum_{s=1}^{n^s} |\dot{\gamma}^s(t)| dt \quad (85)$$

où $\dot{\gamma}^s(t)$ est le taux de glissement par voxel pour le système de glissement s et le pourcentage de volume plastifié ($V_p[\%]$) est donnée par

$$V_p[\%] = \frac{1}{V_{VER}} \int_{VER} \delta(x) dv \times 100. \quad (86)$$

Le choix du seuil d'activation plastique constitue une étape essentielle pour identifier les voxels qui sont considérés plastifiés ou « activés » au sein du VER. Afin de déterminer une valeur appropriée, une étude paramétrique a été menée permettant d'en évaluer l'influence sur la proportion de voxels activés.

Comme le montre la Figure 40, réalisé avec un seul tirage d'orientation aléatoire, le choix du seuil a une influence significative sur le nombre de voxels plastifiés ainsi que sur la fraction de volume plastifié, en modifiant le moment où certains voxels sont considérés comme entrant en régime plastique. Pour une même plage d'amplitudes de contrainte (78 – 90 MPa), la pente de la courbe d'évolution varie sensiblement selon le seuil choisi. Par exemple, pour des seuils compris entre 5×10^{-4} à 1×10^{-3}, la pente évolue entre 28 et 40.

Le seuil retenu dans cette étude a été défini à partir de l'analyse du volume plastifié. Ce choix s'appuie également sur le fait que l'amplitude de 90 MPa reste nettement inférieure à la limite d'élasticité $Rp_{0.2}$ (environ 132 MPa), ce qui indique que le matériau ne devrait pas être considéré comme entièrement plastifié à cette contrainte. Le seuil adopté, $seuil_{voxel} = 7 \times 10^{-4}$, conduit à une proportion relativement faible de voxels plastifiés pour une amplitude de 90 MPa, représentant environ 10 % du volume total (Figure 40(c,d)).

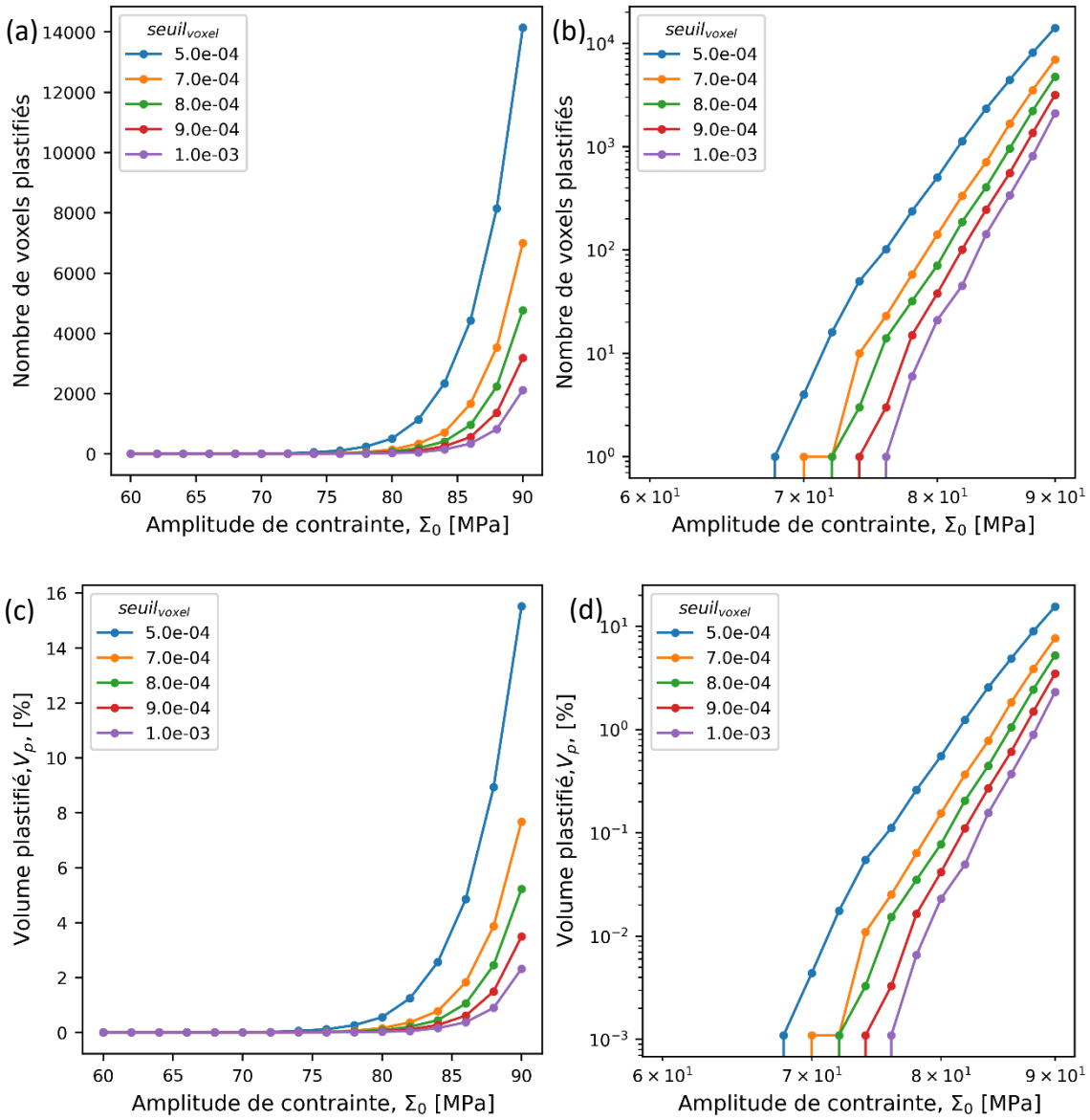


Figure 40. Évolution du nombre de voxels plastifiés en fonction du seuil ($5 \times 10^{-4} - 1 \times 10^{-3}$) pour un tirage d'orientation : (a) échelle linéaire, (b) échelle logarithmique. Évolution correspondante du volume plastifié à l'échelle du voxel : (c) échelle linéaire, (d) échelle logarithmique.

Afin de mieux caractériser la courbure observée sur les courbes d'évolution du nombre de voxels plastifiés en fonction de l'amplitude de contrainte une approche complémentaire a été considérée : le calcul de la pente locale

La pente locale, notée $p(X)$, permet d'évaluer la variation de la réponse du matériau en coordonnées logarithmiques. Elle est définie par

$$p(X) = \frac{dY}{dX} = \frac{d(logN_b)}{d(\log \Sigma_0)} = \frac{\Sigma_0}{N_b}\frac{dN_b}{d\Sigma_0} \quad (87)$$

où N_b est le nombre de zones plastifiées. Si p reste constant, la courbe suit une loi puissance ($N_b \propto \Sigma_0^{p(X)}$). En revanche, une variation de p indique que l'exposant de cette loi évolue localement.

La Figure 41(a) présente le nombre de voxels au sein desquels un glissement plastique est observé pour un tirage d'orientation aléatoire, avec un seuil fixé à $seuil_{voxel} = 7 \times 10^{-4}$. Il est constaté que le nombre de voxels plastifiés augmente avec l'amplitude de chargement : plus celle-ci est élevée, plus la proportion de la zone soumise à un comportement plastique devient importante. Ce résultat était attendu en raison des ingrédients de plasticité cristalline défini précédemment.

Dans une représentation logarithmique Figure 41(b), l'évolution du nombre de voxels plastifiés présente une légère courbure, traduisant une variation progressive de la réponse du matériau selon la plage d'amplitude considérée. Une *spline* cubique a été ajustée sur les données dans l'espace log-log. La dérivée de cette *spline* fournit la pente locale $p(X)$, associée à l'exposant de la loi puissance.

La Figure 41(c) illustre l'évolution de la pente locale, qui varie entre environ 30 et 40 pour des amplitudes comprises entre 76 MPa et 90 MPa. Un ajustement linéaire moyen effectué sur l'ensemble de la plage 74 – 90 MPa conduit à une pente moyenne d'environ 34. Cette plage couvre deux décades en nombre de voxels plastifiés. L'évolution du nombre de voxels plastifiés met ainsi en évidence un comportement proche d'une loi de puissance régulière (linéarité en échelle log–log), résultat en accord avec les observations expérimentales (Munier, 2012).

Comme discuté dans le chapitre 1, section 1.6, le modèle probabiliste repose sur l'hypothèse que l'apparition des sites suit un processus ponctuel de Poisson, avec un nombre de sites actifs décrit par une loi de puissance d'exposant m, $N(\Omega) = \frac{V}{V_0}\left(\frac{\Sigma_0}{S_0}\right)^m$. Cette hypothèse a été validée par Munier (Munier, 2012), qui a comptabilisé le nombre total de bandes de glissement persistantes (BGPs) observées en surface (Figure 12, chapitre 1), montrant une croissance qui suit également une loi de puissance.

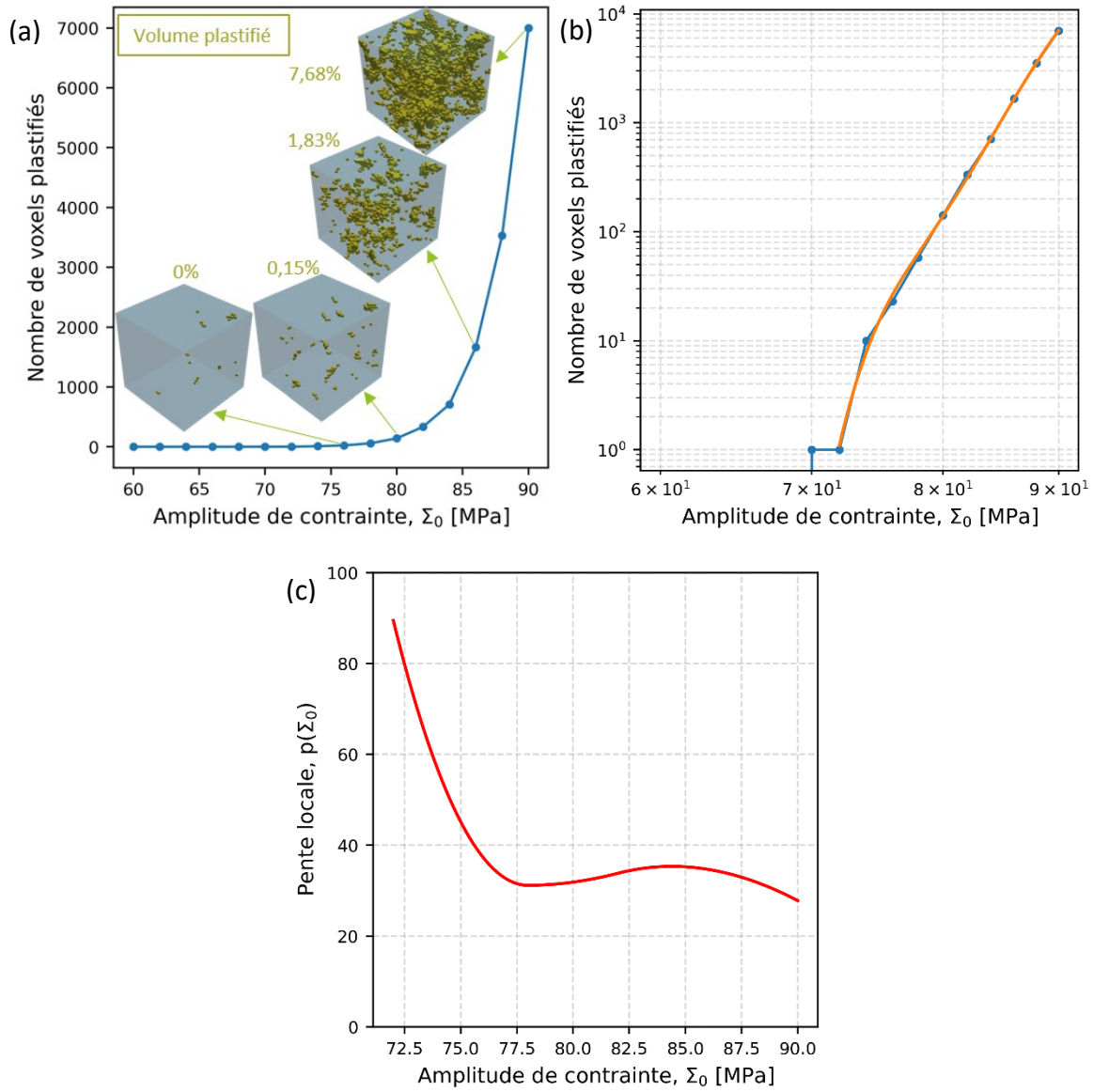


Figure 41. (a) Répartition des voxels plastifiés pour un seuil de 7×10^{-4} à la fin d'un cycle : voxels plastifiés en jaune, voxels élastiques en vert. (b) Évolution du nombre de voxels plastifiés en échelle logarithmique avec un ajustement par spline. (c) Évolution de la pente locale pour un tirage d'orientation et de tessellation donné.

3.1.1.2. Glissement plastique cumulé par grain

L'étape suivante consiste à modifier l'échelle de moyennage. Cette fois, le glissement plastique est moyenné par grain. Le glissement plastique cumulé pour un grain, noté Δv_{grain} est calculé dans un cycle à partir des relations suivantes

$$\forall\ grain \in VER\ ,\ \ \Delta v_{grain} = \frac{1}{V_{grain}} \int \Delta v_{voxel} dv\ . \qquad (88)$$

La variable d'étude binaire (séparation des grains en deux groupes) est alors donnée par

$$\delta(x) = \begin{cases} 1, & si\ \Delta v_{grain} \geq seuil_{grain}\ (grain\ plastifié) \\ 0, & si\ \Delta v_{grain} < seuil_{grain}\ (grain\ élastique) \end{cases}. \qquad (89)$$

La Figure 42, montre aussi l'influence du $seuil_{grain}$ sur le nombre de grains plastifiés et sur le volume plastifié pour un tirage d'orientation et de tessellation aléatoire. Pour une même plage de contraintes étudiée (78 – 90 MPa), la pente de la courbe d'évolution varie sensiblement selon le seuil considéré. Par exemple, pour des seuils allant de $1{,}0 \times 10^{-5}$ à $2{,}0 \times 10^{-4}$, la pente varie entre 10 à 34. Dans cette étude, le choix du $seuil_{grain}$ ne repose pas sur le pourcentage de volume plastifié à 90 MPa, mais sur un choix de l'amplitude à partir de laquelle le phénomène plastique débute, soit 74MPa, ce qui correspondant à $seuil_{grain} = 7{,}0 \times 10^{-5}$.

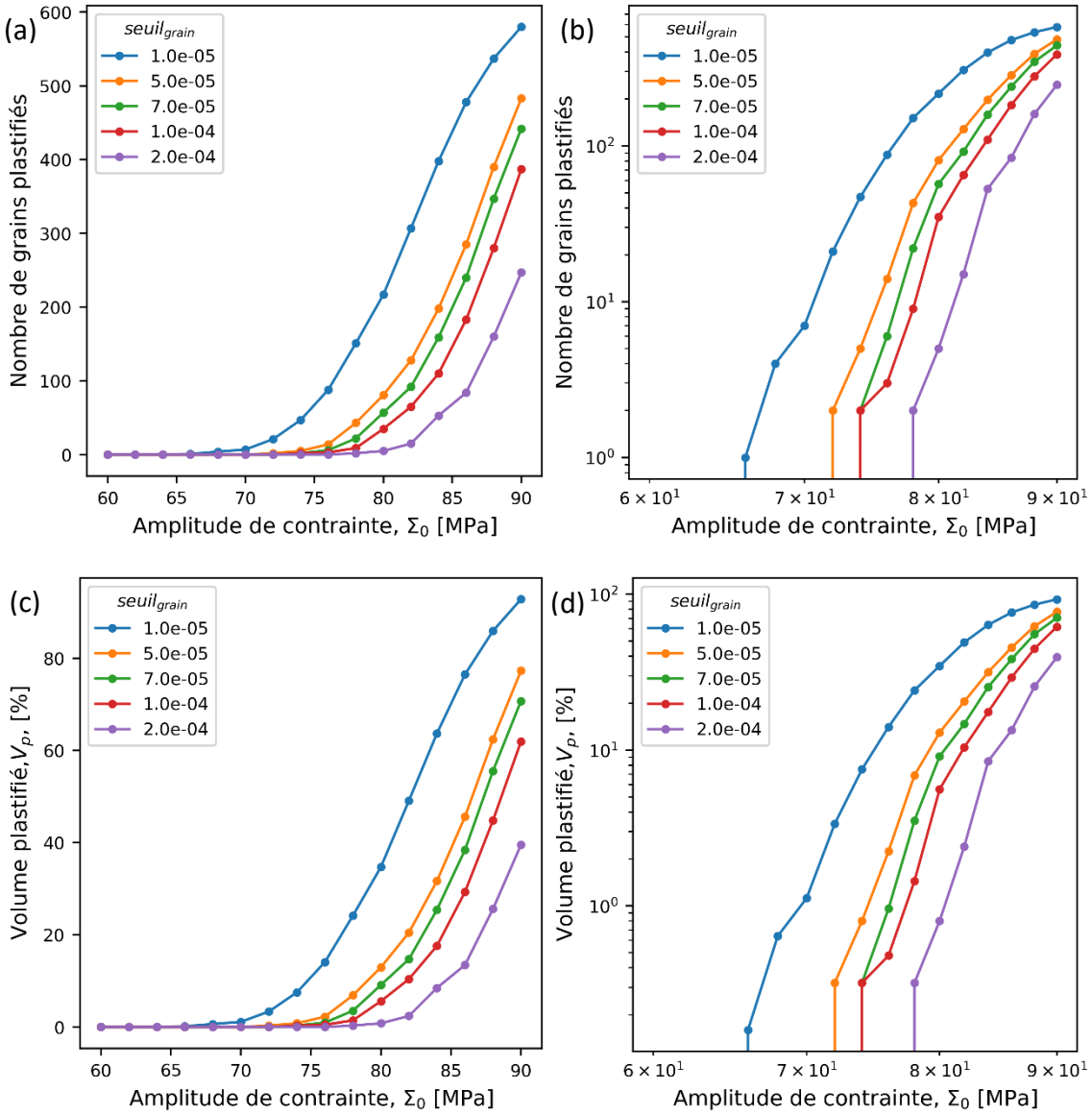


Figure 42. Évolution du nombre de grains plastifiés en fonction du seuil ($5 \times 10^{-5} - 2 \times 10^{-4}$) pour un tirage d'orientation : (a) échelle linéaire, (b) échelle logarithmique. Évolution correspondante du volume plastifié à l'échelle du grain : (c) échelle linéaire, (d) échelle logarithmique.

Selon la Figure 43(a), il est observé que le nombre de grains plastifiés augmente avec l'amplitude de chargement, comme cela avait déjà été constaté à l'échelle du voxel. Dans la Figure 43(b), de façon analogue à la Figure 41(b), une *spline* cubique a été ajustée sur les

données dans l'espace log-log. Cependant, une courbure plus marquée apparaît, indiquant un comportement moins linéaire que celui observé pour l'approche par voxel.

La Figure 43(c) met en évidence une forte variabilité de la pente locale qui varie de façon décroissante entre 60 et 15 pour les amplitudes comprises entre 74MPa et 90MPa.

Un ajustement linéaire moyen effectué entre 74 et 80 MPa (correspondant à moins de 10 % du volume plastifié) donne une pente moyenne de 44.

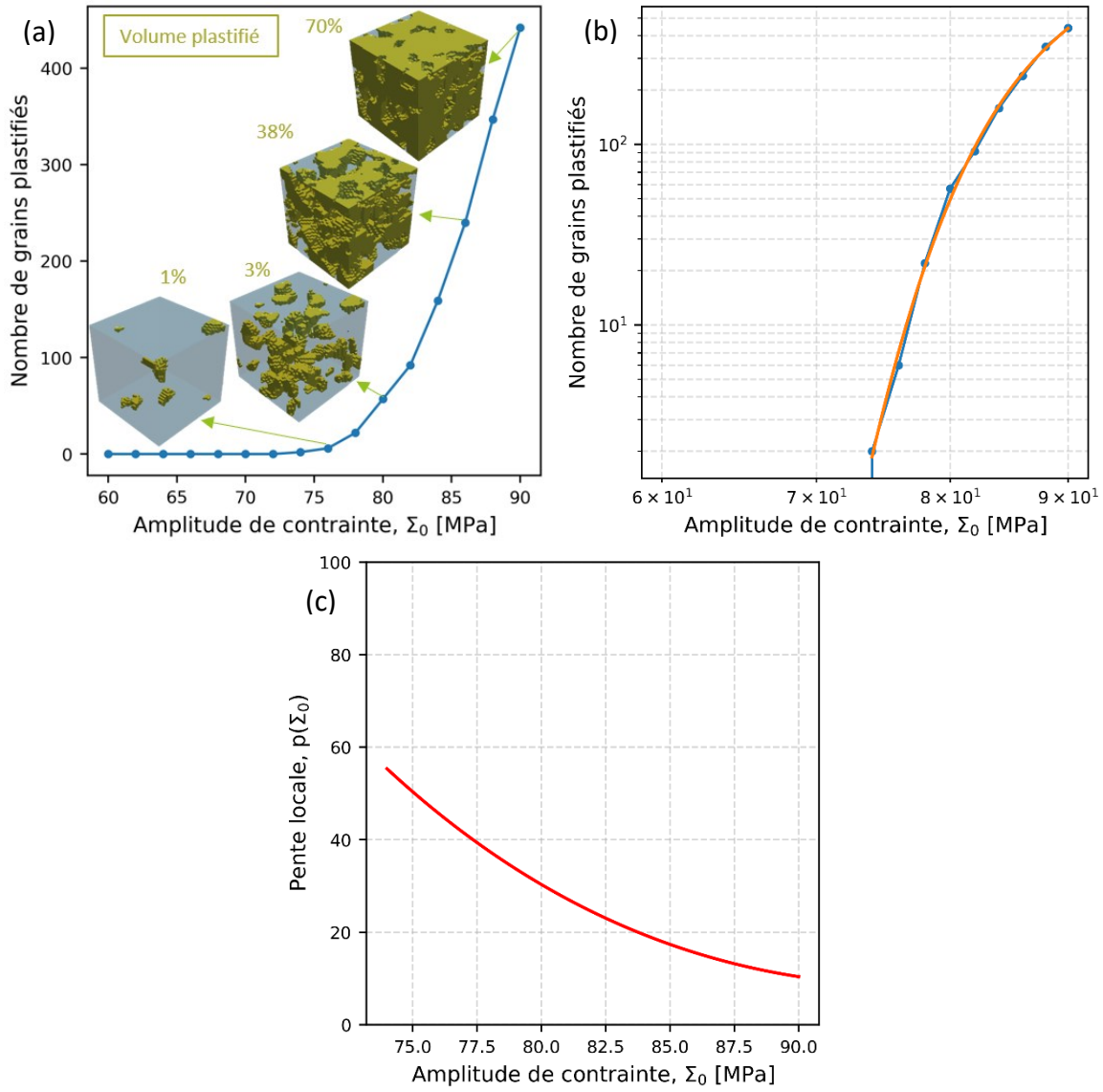


Figure 43. (a) Répartition des grains plastifiés pour un seuil de 7×10^{-5} à la fin d'un cycle : grains plastifiés en jaune, grains élastiques en vert. (b) Évolution du nombre de grains plastifiés en échelle logarithmique avec un ajustement par spline. (c) Évolution de la pente locale pour un tirage d'orientation et de tessellation donné.

3.1.2. Influence du tirage des orientations sur l'activation du glissement plastique

Il est également essentiel de considérer l'aspect statistique de l'analyse. Comme cela a été démontré dans le chapitre 2, le tirage des orientations joue un rôle déterminant dans l'étude de la dissipation et de la microplasticité.

30 volumes élémentaires représentatifs (VER) ont donc été étudiés, une sommation du nombre de zones plastifiées a été effectuée pour chaque amplitude de chargement. En effet, plutôt qu'un simple moyennage, l'ensemble du comportement des voxels a été pris en compte. Ainsi, les 30 tirages ne sont pas considérés comme 30 VER distincts, mais comme une population statistique unifiée représentant le comportement global du matériau.

La Figure 44 présente l'évolution du nombre de voxels plastifiés pour 30 tirages, ainsi que les variations associées des pentes locales. Lorsque la pente moyenne est calculée pour des amplitudes comprises entre 70 MPa et 90 MPa (correspondant à environ 10 % de voxels plastifiés), une valeur moyenne de 41 est obtenue.

La Figure 45 illustre, de manière analogue, l'évolution du nombre de grains plastifiés, accompagnée des pentes locales et des courbures correspondantes. Dans ce cas, la pente moyenne calculée pour la plage de 70 MPa à 80 MPa (également jusqu'à 10 % de grains plastifiés) atteint une valeur de 45.

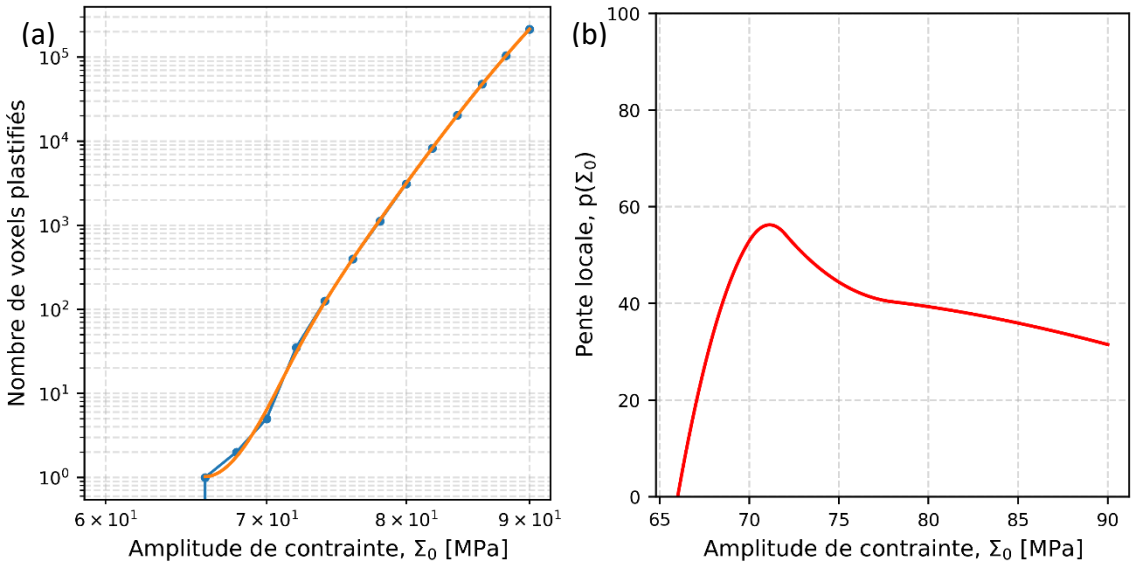


Figure 44. (a) Évolution du nombre de voxels plastifiés en échelle logarithmique avec un ajustement par spline. (b) évolution de la pente locale pour 30 tirages d'orientation et de tessellation.

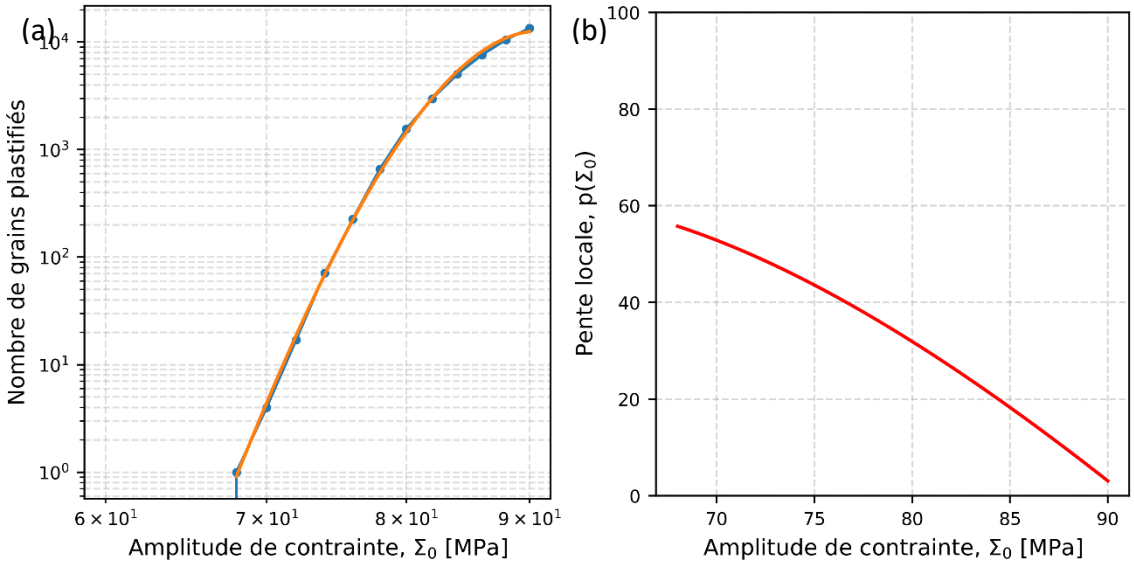


Figure 45. (a) Évolution du nombre de grains plastifiés en échelle logarithmique avec un ajustement par spline. (b) évolution de la pente locale pour 30 tirages d'orientation et de tessellation.

Dans les Figure 46 et Figure 47, le nombre de voxels/grains plastifiés en pourcentage est comparé pour 1 et 30 tirages des orientations et de tessellation. Il est notable que, globalement aucune différence significative n'est observée, sauf pour les faibles pourcentages de voxels/grains plastifiés et les faibles amplitudes de chargement. Cela souligne la nécessité d'un échantillonnage statistique suffisant (30 tirages des orientations) lorsque l'activation des premiers sites plastiques est d'intérêt, ce qui sera le cas pour l'étude du comportement en fatigue (section 3.4).

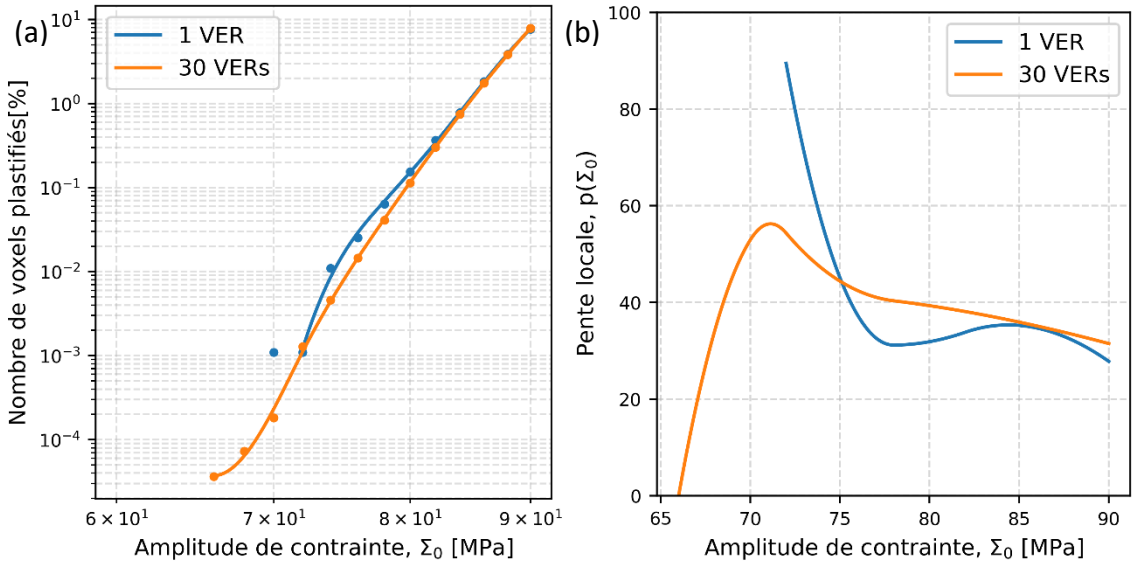


Figure 46. Comparaison (a) de l'évolution du nombre de voxels plastifiés en pourcentage, en échelle logarithmique, avec un ajustement par spline et (b) l'évolution de la pente locale pour 1 et 30 tirages d'orientation et de tessellation.

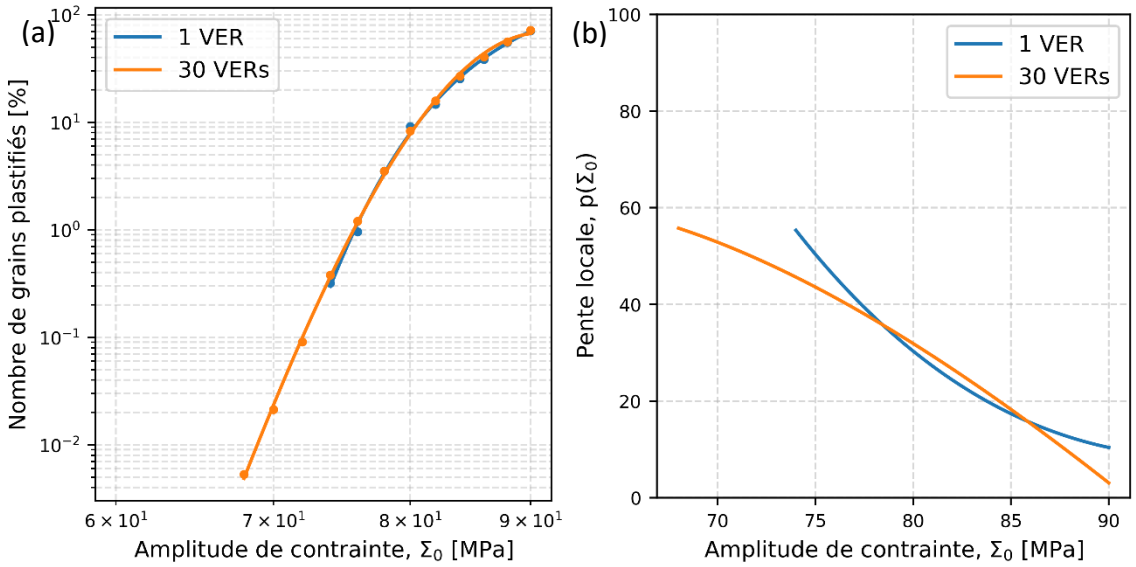


Figure 47. Comparaison (a) de l'évolution du nombre de grains plastifiés en pourcentage, en échelle logarithmique, avec un ajustement par spline et (b) l'évolution de la pente locale pour 1 et 30 tirages d'orientation et de tessellation.

3.1.3. Évolution de la dissipation intrinsèque moyenne par cycle

À la suite de l'analyse de l'activation progressive de la microplasticité, l'attention se concentre désormais sur l'évolution de la dissipation intrinsèque moyenne par cycle. La Figure 48 montre son évolution en fonction des amplitudes de chargement qui varient entre 60 MPa et 90 MPa. Il est observé que pour des valeurs d'amplitude plus élevées, davantage d'hétérogénéités apparaissent dans le champ de dissipation, comme l'indiquent les points (en jaunes et rouges) sur la Figure 49.

De façon analogue, à la démarche dans la sous-section 3.1.1 et 3.1.2, un ajustement par *spline* a été réalisé sur la Figure 48(b), où la variable analysée est la dissipation moyenne par cycle, $\widetilde{D}$, au lieu du nombre de voxels/grains à plastifier. La pente locale $p(X)$ est redéfinie comme

$$p(X) = \frac{dY}{dX} = \frac{d\left(log\widetilde{D}\right)}{d(\log \Sigma_0)} = \frac{\Sigma_0}{\widetilde{D}} \frac{d\widetilde{D}}{d\Sigma_0}. \quad (90)$$

La Figure 48(b) montre une évolution qui possède aussi une légère courbure analogue à celle précédemment identifiée pour les volumes plastifiés par grain, bien que moins prononcée. La pente locale varie globalement entre 45 et 20 (Figure 48(c)). Il convient de souligner que ce comportement courbé n'est pas observé expérimentalement dans les travaux de Doudard et al., Munier et al., Lepitre et Sévédé (Doudard et al., 2005; Lepitre, 2024; Munier et al., 2014; Sévédé, 2025).

Lorsque l'ajustement linéaire moyen est réalisé sur la plage 60–66 MPa, une pente de 41 est obtenue. Cette plage couvre environ deux décades en dissipation, une variation en accord avec celles observées lors des campagnes expérimentales (Amini, 2021; Lepitre, 2024; Munier, 2012; Sévédé, 2025). En revanche, en étendant l'ajustement linéaire moyen à la plage

60–90 MPa, la pente effective obtenue est de 28. Cette zone couvre près de cinq décades en dissipation, une étendue plus large que celle généralement étudiée expérimentalement.

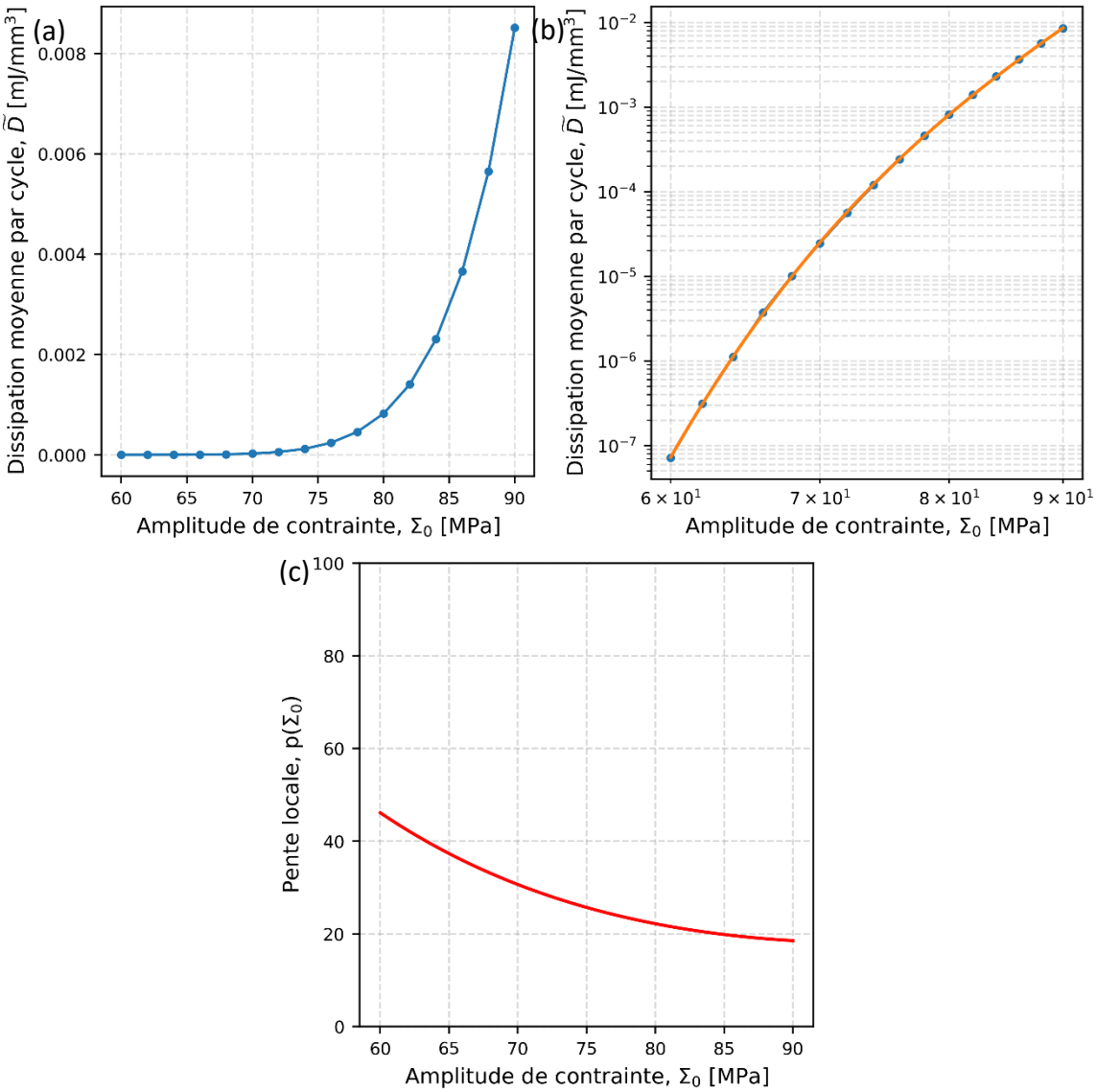


Figure 48.(a) Évolution de la dissipation moyenne par cycle pour un VER de 625 grains en échelle linéaire et (b) en échelle logarithmique avec un ajustement par spline. (c) Évolution de la pente locale pour un tirage d'orientation et de tessellation donné.

La pente effective de 28 se situe dans l'intervalle 10–30 rapporté par (Munier et al., 2014) pour le second régime d'auto-échauffement. Ce régime est, pour de nombreux aciers ferritiques et austénitiques, directement lié aux propriétés en fatigue à grand nombre de cycles (Doudard et al., 2005; Munier et al., 2014).

Ce résultat est particulièrement original, car en partant d'un tirage d'orientations donné et d'un modèle de plasticité cristalline, il a été possible de modéliser qualitativement et quantitativement le second régime de la courbe d'auto-échauffement.

Il est intéressant de noter qu'à l'origine, les lois de comportement visco-élastoplastique ont été développées pour traiter un problème plus général de plasticité (Méric et al., 1991) et non spécifiquement pour cette étude liée au chargement cyclique à faibles amplitudes. Dans la Figure 50, il est montré qu'une faible variabilité de la dissipation moyenne cyclique est obtenue pour 30 tirages des orientations.

Dans la Figure 51, afin de discuter les résultats concernant l'évolution de la dissipation moyenne par cycle au regard du modèle probabiliste à deux échelles, l'évolution des pentes locales obtenues précédemment (activation du glissement plastique) augmentées de deux unités est présentée. Ce décalage de deux unités est introduit dans la mesure où le modèle prédit une loi puissance en Σ_0^m pour l'activation des sites plastiques et en Σ_0^{m+2} pour la dissipation intrinsèque (cf. chapitre 1). Les trois courbes présentent globalement un comportement similaire décroissant avec l'augmentation de l'amplitude de contrainte. En revanche, les résultats mettent en évidence un décalage vers le haut des pentes obtenues pour l'activation des systèmes de glissement par rapport à celle issue de la dissipation. Ainsi le lien entre l'évolution de l'auto-échauffement et celle de l'activation plastique, proposée par le modèle probabiliste à deux échelles n'est pas retrouvé lorsqu'une analyse de l'activation des systèmes de glissement est réalisée à l'échelle des grains ou des voxels. Cela signifie que l'échelle des sites du P.P.P. correspond ni à celle du grain ni à celle du voxel. Dans le prochain chapitre, une échelle intermédiaire sera introduite pour palier cela.

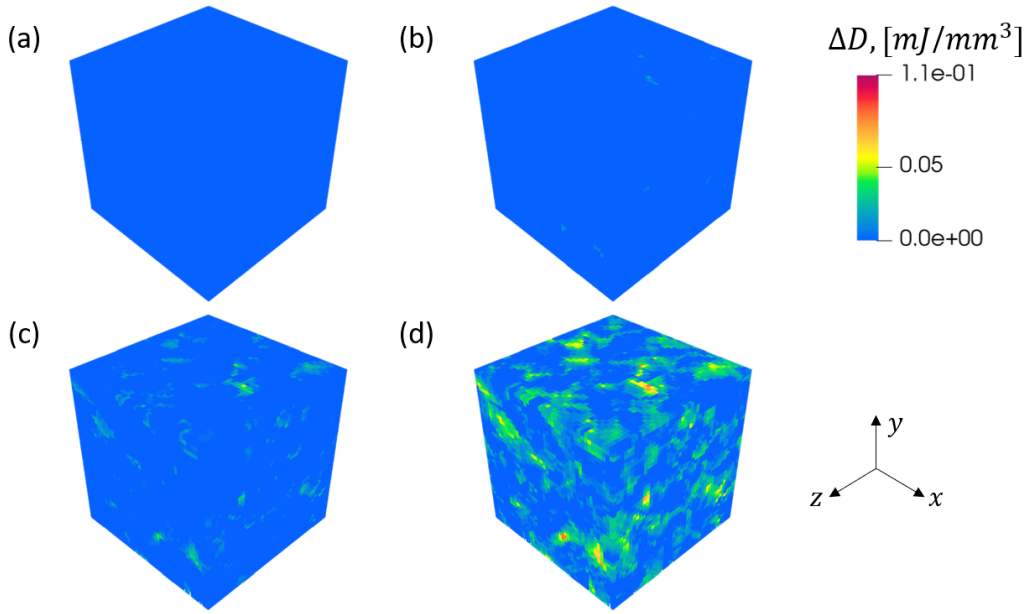


Figure 49. Dissipation moyenne par cycle et par voxel, ΔD pour différentes amplitudes de contrainte (a) 60 MPa, (b) 70 MPa, (c) 80 MPa et (d) 90 MPa.

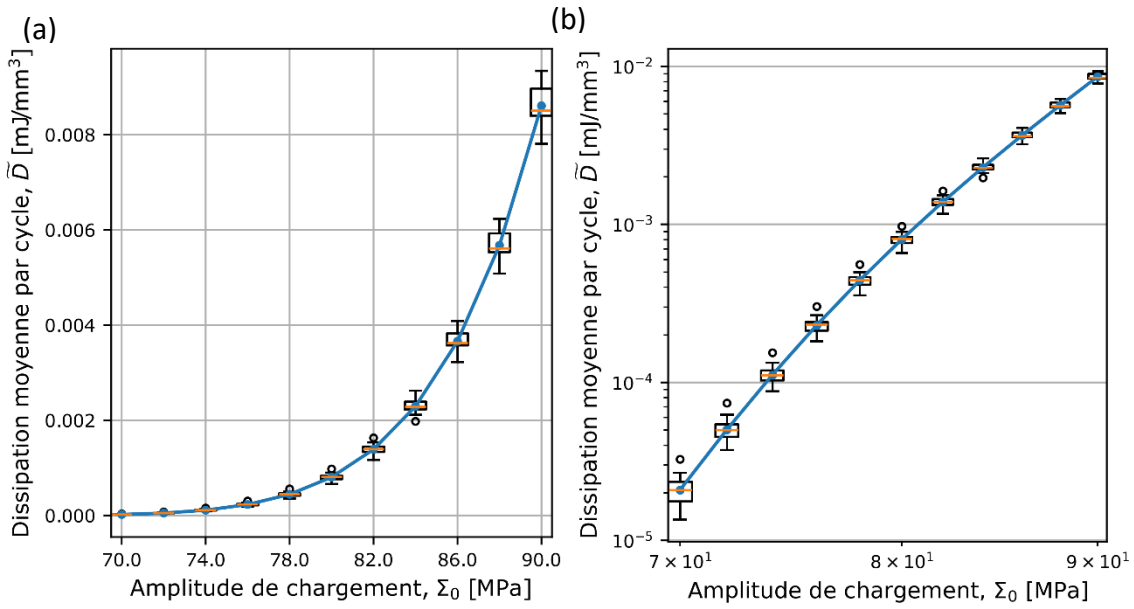


Figure 50. Évolution de la dissipation moyenne par cycle en fonction de l'amplitude de chargement pour 625 grains et 30 tirages d`orientations. (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique. Pour chaque box-plot, le point en bleu représente la moyenne et la ligne orange la médiane.

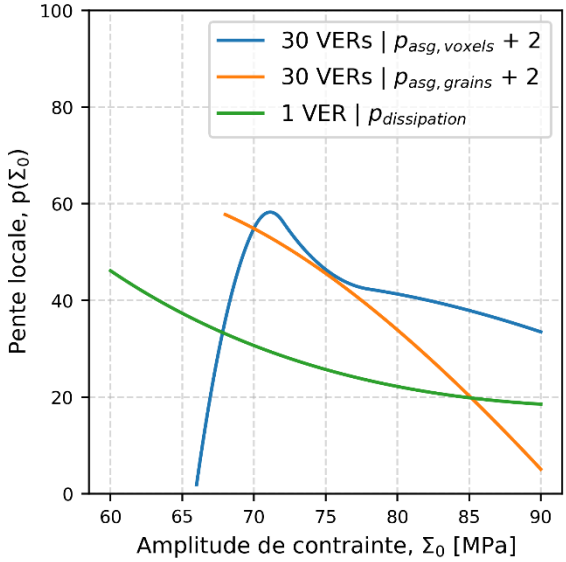


Figure 51. Comparaison des pentes locales p associées au nombre de grains activés, au nombre de voxels plastifiés et à l'évolution de la dissipation, où asg correspond à l'activation des systèmes de glissement.

Dans la section suivante, une analyse de l'anisotropie élastique à partir des paramètres du tenseur d'élasticité sera menée afin de mieux comprendre quels sont les facteurs majeurs qui peuvent changer la pente de l'évolution de la dissipation.

3.2. Influence de l'anisotropie élastique et de l'écrouissage cinématique linéaire sur le comportement mécanique des matériaux

Cette section analyse l'influence de facteurs clés sur le comportement mécanique et la dissipation d'énergie des matériaux. L'accent est mis sur l'anisotropie élastique et l'écrouissage cinématique linéaire, afin de déterminer leur rôle dans l'évolution de la dissipation et de sa pente. L'importance de cette étude réside dans le fait que certains paramètres peuvent avoir un impact majeur sur la réponse globale du matériau, notamment sur la dissipation moyenne par cycle et l'analyse du comportement sous chargement cyclique.

3.2.1. Influence de l'anisotropie élastique

L'étude a été faite précédemment en considérant les paramètres élastiques du α -Fe . Trois autres configurations, avec des valeurs différentes du tenseur d'élasticité des grains, ont été analysées. Les valeurs des paramètres sont présentées dans le Tableau 3.

Il est important de noter que toutes les configurations présentent un comportement macroscopique identique (même E et ν), mais diffèrent au niveau du grain. Les valeurs du facteur de Zener, qui reflètent le niveau d'orthotropie, sont également indiquées. Les composantes du tenseur d'élasticité orthotropique (C_{ij}) ont été déterminées en utilisant la méthode d'homogénéisation proposée par (Kröner, 1958).

	Niveau du polycristal		Niveau du grain			
Matériau	E(GPa)	ν	C_{11}(GPa)	C_{12}(GPa)	$2C_{44}$(GPa)	Z_n
Isotropie élastique	212	0,289	277	113	164	1
Orthotropie élastique	212	0,289	247	128	203	1,7
Orthotropie élastique (α -Fe)	212	0,289	231,5	135	232	2,4
Orthotropie élastique	212	0,289	209,0	147,0	299	4,8

Tableau 3. Paramètres d'anisotropie pour des matériaux de facteur de Zener, Z_n de 1 à 4,8

Ensuite, l'évolution du nombre de voxels plastifiés pour un $seuil_{voxel} = 7 \times 10^{-4}$ ainsi que celle de la dissipation cyclique moyenne en régime stabilisé au cours d'un cycle sont présentées dans la Figure 52.

Comme illustre la Figure 52(a), pour le matériau isotrope élastique avec $Z_n = 1$, l'activation de la microplasticité se produit de manière brusque. En dessous de la limite d'élasticité théorique pour l'orientation la plus critique (environ 80 MPa), aucun voxel n'est soumis à un glissement plastique. En revanche, pour les matériaux avec comportement élastique orthotrope, certains grains présentent un glissement plastique avant même

d'atteindre cette limite. De plus, plus le Z_n est élevée, plus le glissement plastique s'amorce précocement.

Cette différence dans le scénario d'activation aide à expliquer l'évolution de la dissipation cyclique moyenne par cycle, comme illustrée dans les Figure 52(b-c). La courbure est présente pour les différentes valeurs de Z_n, celle-ci tendant à s'atténuer lorsque le facteur de Zener augmente. Si la pente de l'évolution de la dissipation est calculée entre 74 MPa et 90 MPa, les valeurs vont varier de (13 à 33). Ces résultats montrent que les paramètres élastiques influencent fortement la forme de la courbe d'auto-échauffement : une augmentation du facteur de Zener entraîne une évolution plus progressive de la dissipation avec l'amplitude de chargement, ainsi qu'une pente de dissipation moins prononcée, comme le montre la Figure 52(c). Le même comportement est aussi constaté quand les 30 tirages d'orientation sont analysés comme le montre la Figure 53.

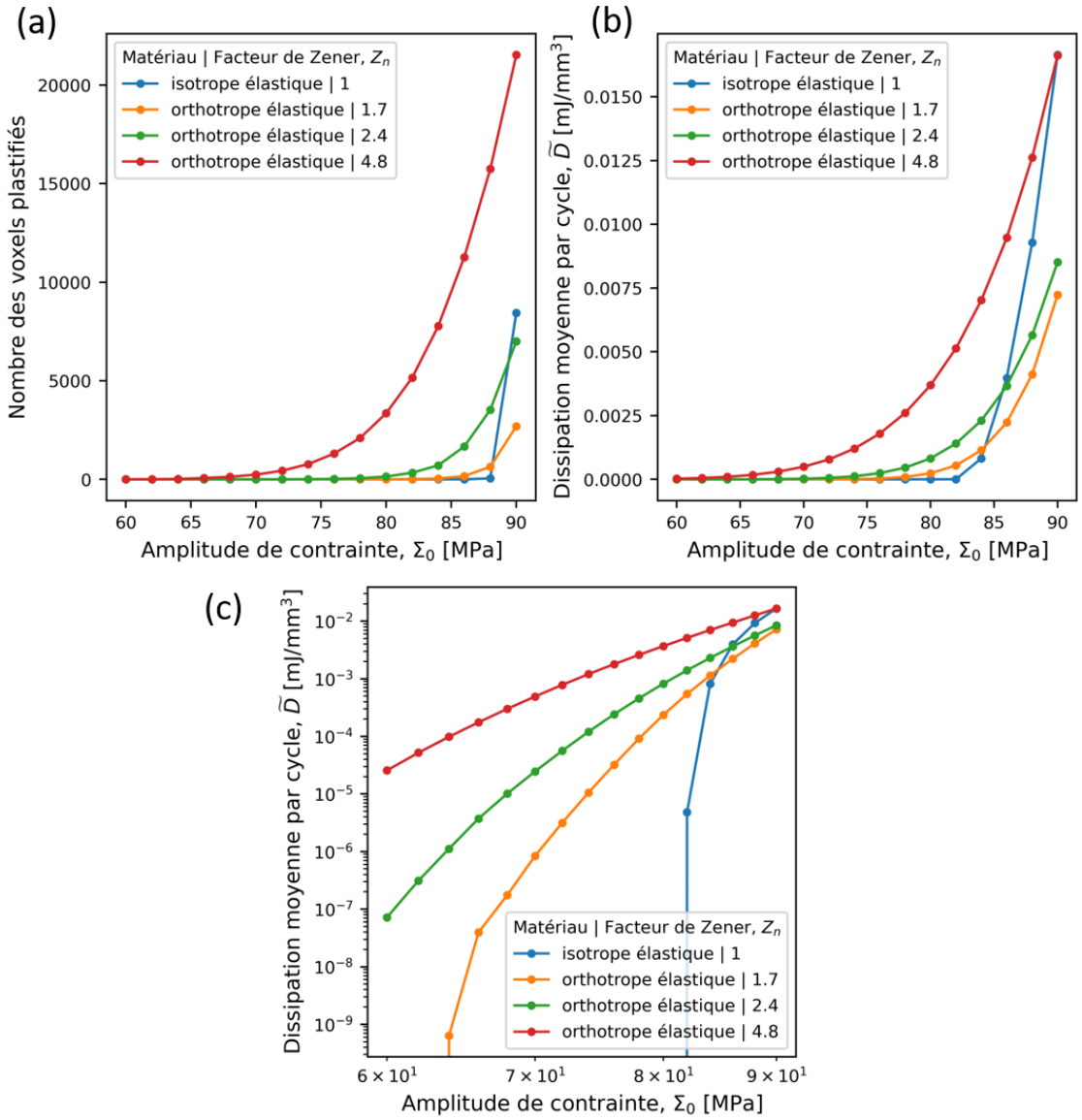


Figure 52. Nombre de voxels plastifiés pour un tirage d'orientation et un seuil de 7×10^{-4} (a), dissipation moyenne par cycle pour différents matériaux et facteur de Zener (b) échelle linéaire et (c) échelle logarithmique

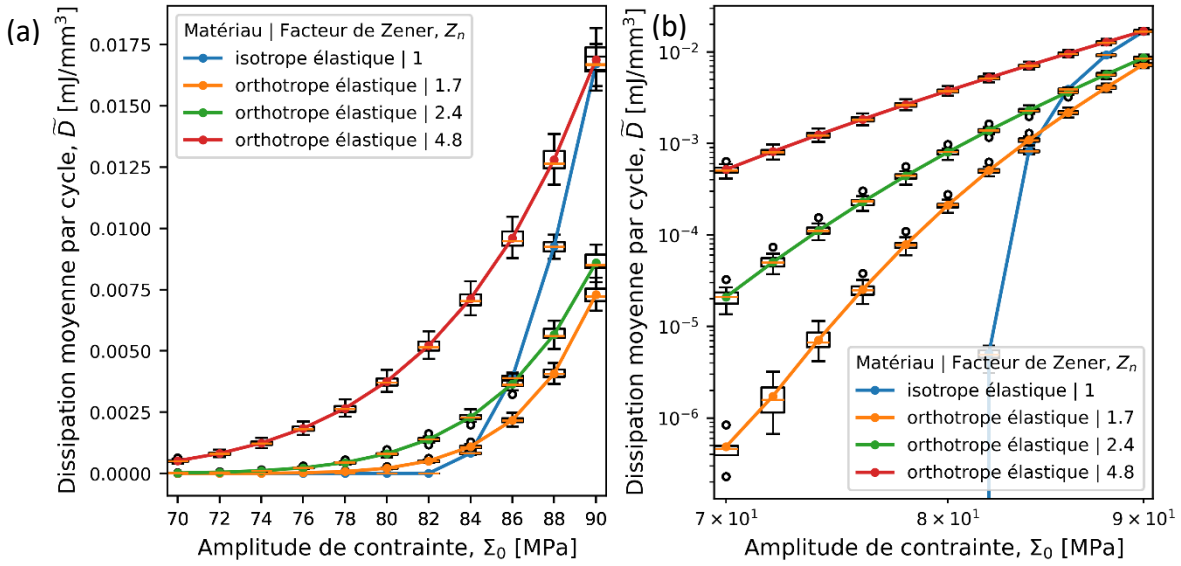


Figure 53. Dissipation moyenne par cycle pour différents matériaux et différents facteurs de Zener (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique

3.2.2. Influence du paramètre de l'écrouissage cinématique linéaire (c)

Dans cette sous-section, l'influence du paramètre c, associé à l'écrouissage cinématique linéaire (Prager, 1956) (cf. chapitre 2) a été analysée. La Figure 54(a) montre que la dissipation moyenne par cycle dépend significativement de la valeur de c. Par contre, en représentation logarithmique (Figure 54(b)), la pente varie très peu avec l'augmentation de c, celle-ci variant de 23 à 20 (calculée entre 74MPa et 90MPa). De plus, l'évolution indique que l'écrouissage cinématique tend à modérer l'intensité de la dissipation cyclique.

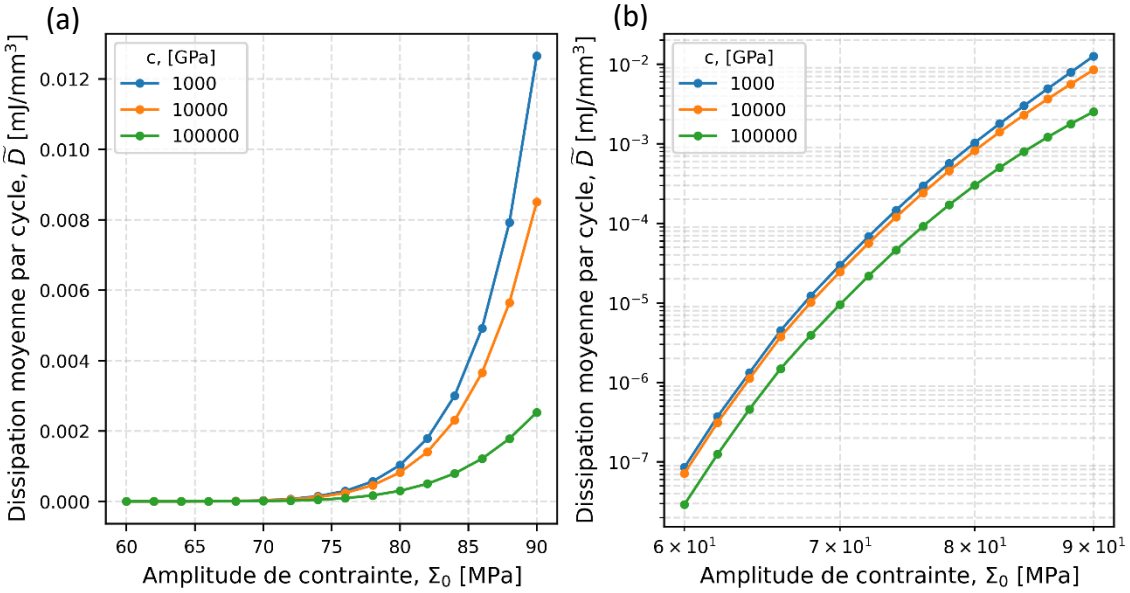


Figure 54. Évolution de la dissipation moyenne par cycle pour des valeurs de c de 1000 à 100 000 (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique

Après avoir analysé l'impact de l'anisotropie élastique et le rôle du paramètre d'écrouissage cinématique linéaire, l'étape suivante consiste à étudier l'effet de la multiaxialité du chargement. Pour cela, l'analyse s'appuie sur la construction de surfaces d'iso-dissipation dans le régime secondaire des courbes d'auto-échauffement.

3.3. Construction d'une surface d'iso-dissipation

Dans cette section, une procédure est proposée afin d'identifier qualitativement et quantitativement le régime secondaire. Elle consiste à appliquer au VER plusieurs trajets de chargements multiaxiaux proportionnels, puis à comparer, pour une valeur donnée de dissipation, le comportement du matériau dans l'espace des contraintes. Cette approche permet d'associer au matériau une surface, analogue aux surfaces de plasticité, mais construite ici pour un niveau fixé d'iso-dissipation ou d'iso-auto-échauffement. La procédure est donc désignée sous le terme essai de surface d'iso-dissipation.

Plusieurs travaux ont déjà utilisé ce type d'essai pour caractériser le comportement multiaxial d'aciers (Doudard, 2004; Poncelet et al., 2010) et du cupro-aluminium (Bercelli, 2021; Ezanno, 2011) dans le régime secondaire et plus récemment dans le régime primaire (Guellec, 2023). L'essai d'iso-dissipation constitue un outil multiaxial permettant une identification globale du comportement dissipatif dans l'espace des contraintes. Contrairement au dépouillement classique des courbes d'auto-échauffement, mené indépendamment pour chaque direction de chargement, cette approche permet de relier la réponse du matériau sur un large ensemble de directions de sollicitation.

Concrètement, des trajets proportionnels successifs combinant traction et torsion sont imposés au VER afin de capter le comportement dissipatif moyen du matériau. La démarche s'inspire des procédures expérimentales utilisées pour identifier des surfaces de seuil de plasticité (Khan et al., 2009) lesquelles permettent de représenter, dans le plan des contraintes, la géométrie des surfaces seuils et d'en déduire la forme la plus pertinente pour le modèle constitutif.

3.3.1.1. Chargement, conditions limites et évolution de la dissipation moyenne par cycle

Un tenseur de contraintes traction-torsion multiaxial est appliqué à l'agrégat polycristallin. L'amplitude du chargement varie de 70 à 90 MPa. Les conditions aux limites sont identiques à celles utilisées pour le chargement uniaxial (périodicité) et 30 tirages d'orientation sont utilisées avec un rapport de charge de R = -1. Le tenseur de contraintes moyen appliqué à l'agrégat polycristallin est donné par

$$\underline{\underline{\sigma}}(t) = \Sigma_0 f(t) \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{sin(\alpha)}{\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{sin(\alpha)}{\sqrt{3}} & cos(\alpha) \end{bmatrix}_{(x_g, y_g, z_g)} , \quad (91)$$

où la direction du chargement α est définie telle que pour un niveau de contrainte Σ_0 , la contrainte en traction est donnée par $\sigma_{zz} = \Sigma_0 f(t) cos(\alpha)$ et la contrainte en torsion par $\sqrt{3}\sigma_{yz} = \Sigma_0 f(t) sin(\alpha)$. Les directions de chargement varieront de 0° à 90°. Le protocole d'essai d'iso-dissipation est décrit dans la Figure 55. En résumé, une série d'essais numériques est réalisée sur un agrégat avec 30 tirages différents d'orientations. Pour chacune des configurations une campagne d'essais d'auto-échauffement réduite est mené. Elle consiste à réaliser plusieurs essais d'AE successifs sur une même éprouvette en faisant varier la direction du chargement α (pour chaque direction, les mêmes niveaux d'amplitude des contraintes équivalente (von Mises) sont considérés). Une fois l'ensemble des essais effectués, une dissipation cible commune $\widetilde{D}_{off}$ et l'amplitude de contraintes Σ_{off} est identifié sur chaque trajet. Cette contrainte donne deux points ($\Sigma_{off,max}$ et $\Sigma_{off,min}$) qui sont reportés dans l'espace des contraintes normalisés ($\sigma_{zz}/\sigma_{zz,\alpha=0}$, $\sqrt{3}\sigma_{yz}/\sigma_{zz,\alpha=0}$) afin de faciliter la lecture et la compréhension, permettant par la suite d'identifier un modèle descriptif. Il est à noter que le choix de $\widetilde{D}_{off}$ est arbitrairement effectué pour correspondre à un niveau de dissipation cohérent vis-à-vis du régime secondaire. Ensuite, le protocole est appliqué pour différents matériaux virtuels décrits dans la sous-section 3.2.

L'évolution de la dissipation cyclique en fonction de l'amplitude de chargement pour différentes valeurs de α et de facteurs de Zener est montrée dans la Figure 56. Cette évolution dépend de la direction du chargement, comme l'indiquent les niveaux variables d'intensité de la dissipation pour différents α. Cette différence est plus marquée pour des valeurs plus élevées de α. Plus le rapport de Zener est élevé, moins les valeurs de la dissipation moyenne sont dépendantes de la direction du chargement.

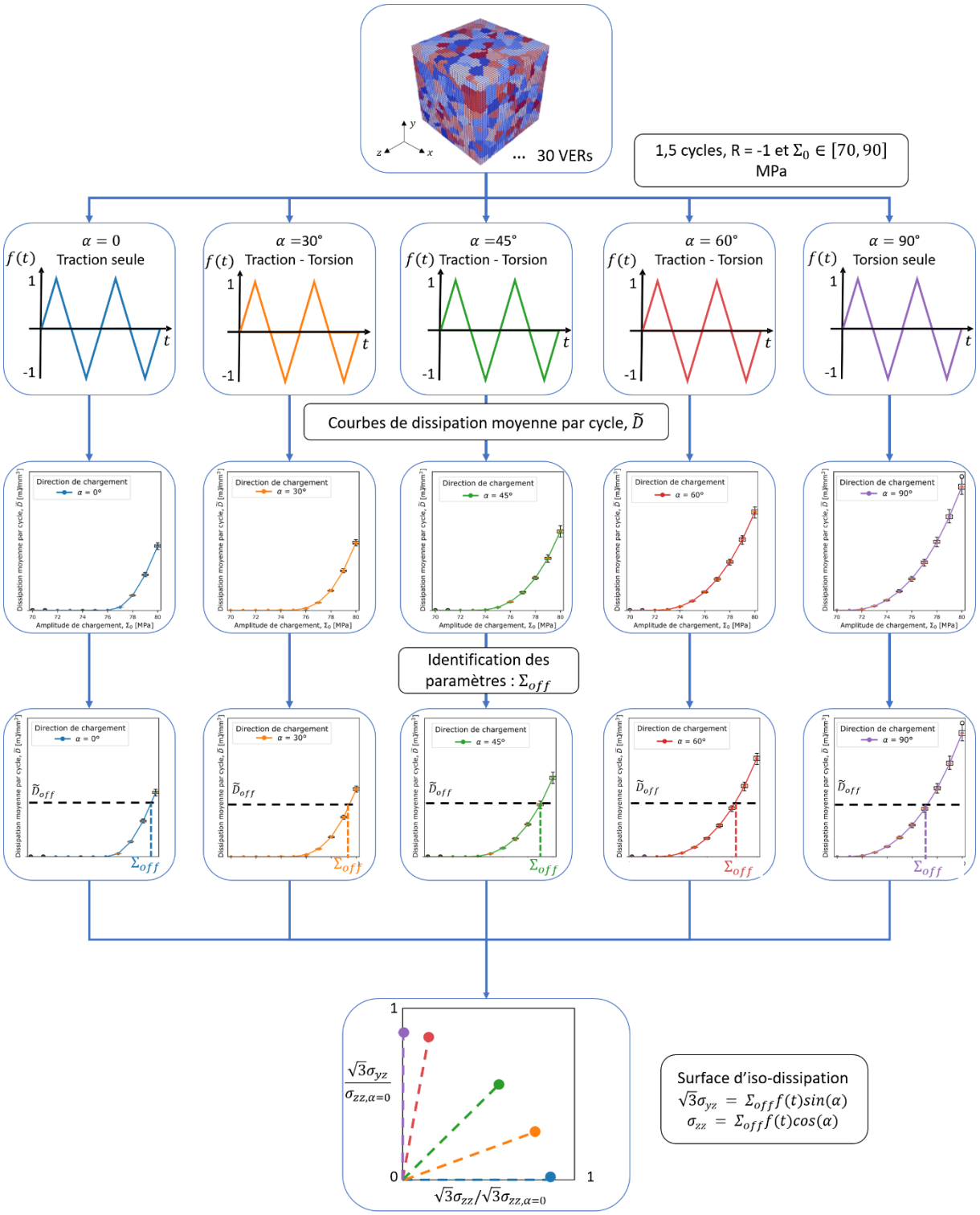


Figure 55. (a) Protocole d'essais des surfaces d'iso-dissipation pour le deuxième régime

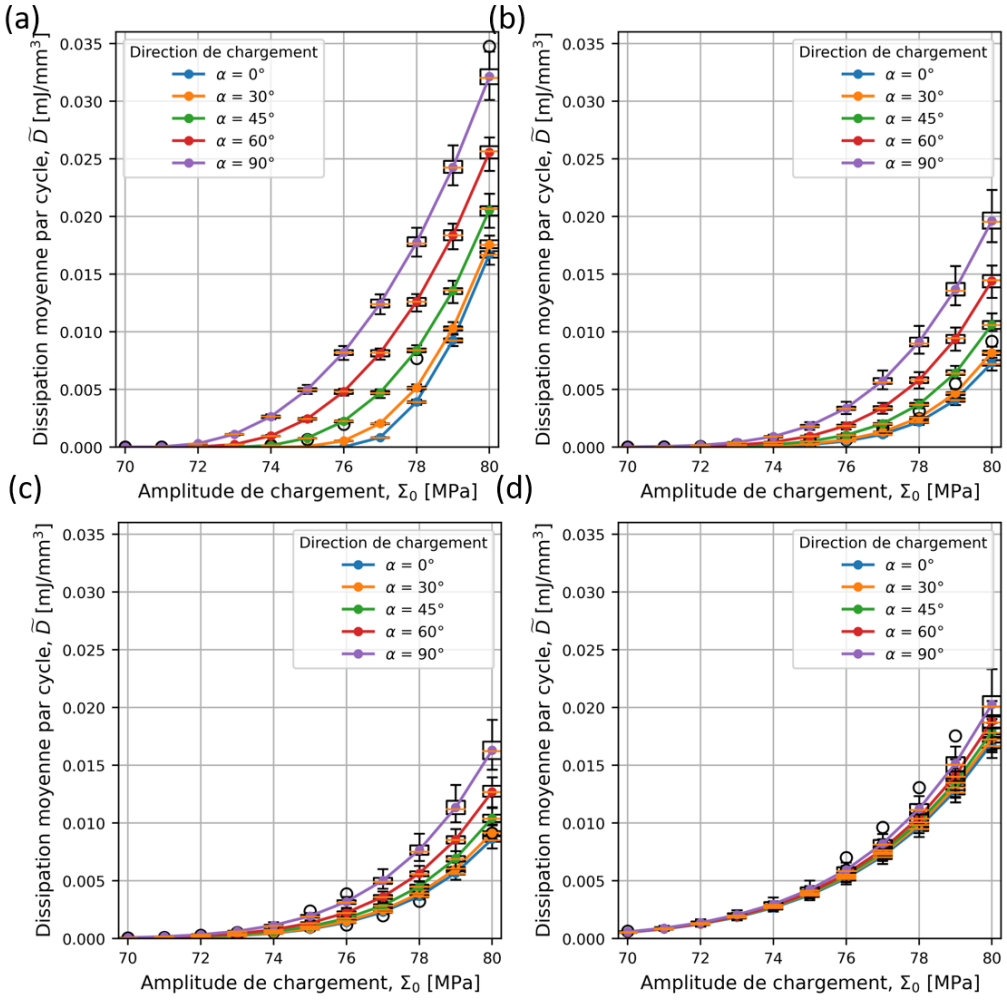


Figure 56. Évolution de la dissipation moyenne par cycle pour différentes directions de chargements et différents facteurs de Zener de 1(a), 1,7(b), 2,4(c) et 4,8(d).

La Figure 56 peut également être représentée d'une autre manière en introduisant le concept de surfaces d'iso-dissipation (Bercelli, 2021; Ezanno, 2011; Guellec, 2023; Poncelet et al., 2007, 2010). Comme discuté lors du protocole dans la Figure 55, pour chaque direction de chargement (α), l'amplitude de contrainte correspondant au même niveau de dissipation cyclique moyenne est déterminée, et les résultats sont affichés dans le plan des contraintes (Figure 57). Les résultats sont normalisés et les critères de rupture de von Mises et de Tresca sont également représentés. Ces critères sont ajustés à la valeur obtenue pour α = 0.

Il peut être observé que les surfaces sont localisées entre les deux critères et dépendent du niveau de dissipation cyclique. Plus le niveau de dissipation cyclique est élevé, plus la surface iso-dissipation se rapproche du critère de von Mises. Une dépendance similaire a été observée expérimentalement par (Guellec, 2023) pour un acier à faible teneur en carbone. De plus, il peut être noté qu'à mesure que le rapport de Zener augmente, les critères se rapprochent du critère de von Mises. Pour le cas isotrope, aux niveaux de dissipation les

plus bas, les critères s'alignent davantage avec critère de Tresca. Un lien entre la surface iso-dissipation et les critères de fatigue cyclique multiaxiaux peut être établi eg. (Bercelli, 2021; Ezanno, 2011; Guellec, 2023; Poncelet et al., 2007, 2010). Par conséquent, les résultats obtenus dans cette étude sont particulièrement intéressants et fournissent des informations pouvant aider à choisir entre des critères de fatigue basés sur le plan critique ou sur les invariants de contraintes, en fonction des configurations étudiées.

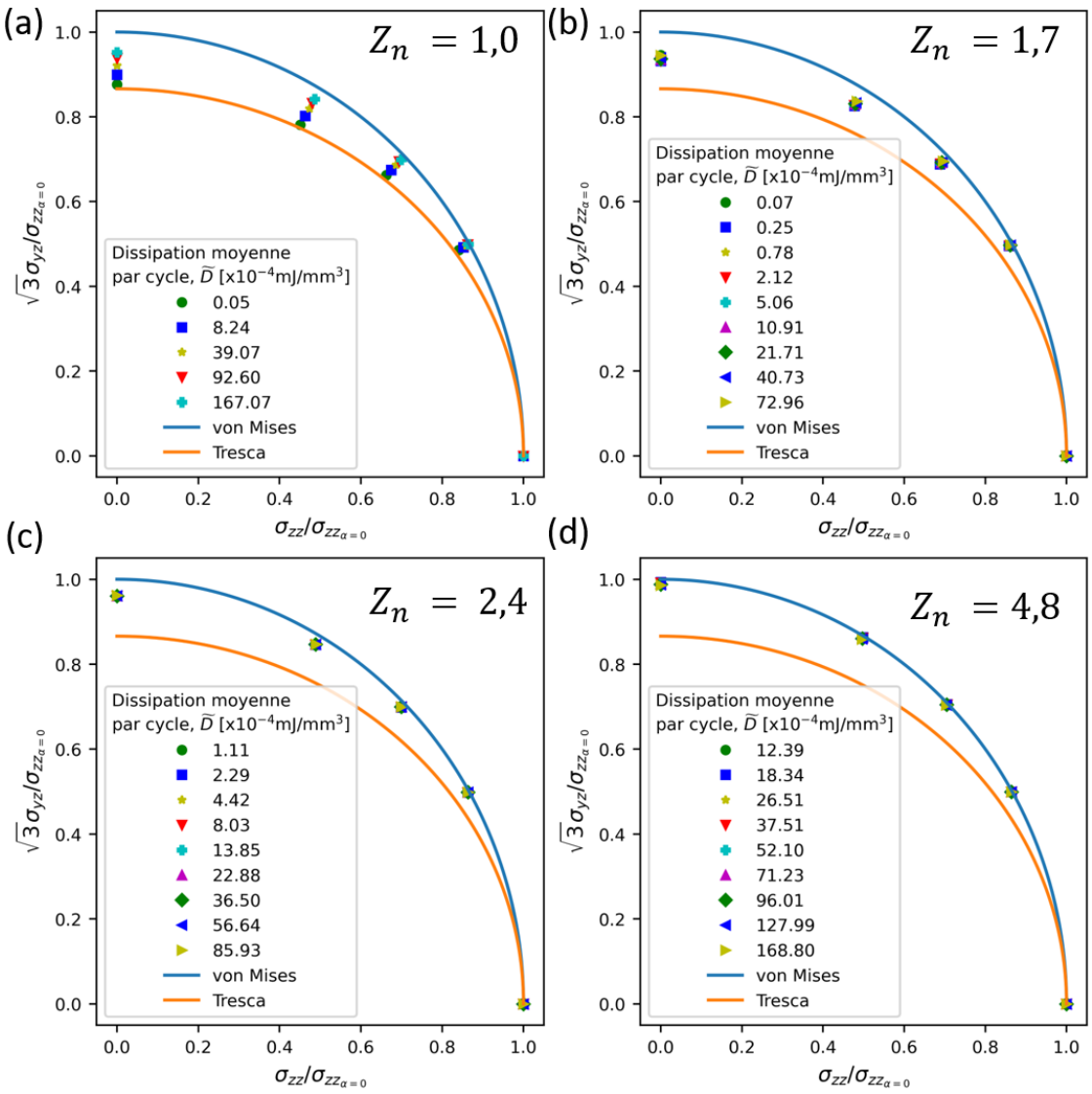


Figure 57.Distribution des surfaces d'iso-dissipation pour différents niveaux de dissipation et facteurs de Zener de 1(a), 1,7(b), 2,4(c) et 4,8(d)

3.3.2. Conclusion Intermédiaire

Pour conclure, une étude a été réalisée sur le comportement d'un agrégat polycristallin soumis à un chargement cyclique de faible amplitude. La microplasticité apparaît de manière localisée (Figure 49), plutôt que sous une combinaison diffuse et localisée. Deux échelles d'analyse ont été considérées : celle du voxel et celle du grain, avec un seuil défini pour le début de l'activité plastique.

Dans le dialogue entre l'approche numérique considérée dans cette étude et le modèle probabiliste à deux échelles, il apparaît que l'apparition de sites activés tels que modélisés par un Processus Ponctuel de Poisson (P.P.P) ne peuvent être assimilés à des grains ou à des voxels. En effet, il a été montré que la courbe de dissipation moyenne par cycle présente une allure similaire au deuxième régime de la courbe d'auto-échauffement, mais que le lien entre cette évolution et le P.P.P. n'était pas encore entièrement établi, comme l'illustre la Figure 51 avec l'évolution de la pente locale.

En outre, les études sur des possibles facteurs d'influence sur la dissipation moyenne par cycle ont été réalisés pour chercher identifier les facteurs de premier ordre qui peuvent influencer la dissipation moyenne par cycle. À partir de l'étude de l'anisotropie élastique, il a été constaté que les paramètres du tenseur d'élasticité influencent fortement l'apparition de la microplasticité. Un rapport de Zener plus élevé entraîne une activation plus progressive de la microplasticité et une pente moins abrupte de la courbe de dissipation moyenne par cycle en échelle logarithmique.

L'influence du paramètre de l'écrouissage cinématique linéaire a été étudié sur une plage donnée. Il convient de souligner qu'il a peu d'influence sur la pente de la courbe de la dissipation moyenne par cycle dans un diagramme log-log. En revanche, il a une influence plus marquée sur l'intensité de la dissipation.

Enfin, les chargements multiaxiaux ont été étudiés à l'aide du concept de surfaces iso-dissipation pour des matériaux présentant un facteur de Zener compris entre 1 et 4,8. Les surfaces se situent entre les critères de von Mises et de Tresca, et dépendent du niveau de dissipation cyclique. Plus le niveau de dissipation moyenne cyclique pour tracer la surface est élevé, plus la surface d'iso-dissipation se rapproche du critère de von Mises. Pour le matériau isotrope, pour les niveaux de dissipation les plus faibles, les surfaces tendent davantage vers le critère de Tresca. Ces résultats préliminaires montrent une bonne cohérence avec les études expérimentales existantes et ouvrent des perspectives pour établir des liens avec la fatigue multiaxiale.

Dans la prochaine section, une étude des indicateurs de fatigue est réalisée à travers un critère basé sur le glissement plastique cumulé dans le but d'établir une corrélation avec les courbes d'auto-échauffement.

3.4. Indicateurs de Fatigue (FIP)

Dans cette section, un indicateur de fatigue sera proposé afin d'établir un lien entre les modèles de fatigue et les courbes d'auto-échauffement à l'image de ce que permet le modèle à deux échelles. Un indicateur de fatigue basé sur le glissement plastique cumulé sera mis en place, en considérant toujours les deux mêmes échelles, à savoir celle du voxel, et celle du grain.

3.4.1. Introduction bibliographique

Une étude est consacrée aux indicateurs de fatigue (FIPs), qui représentent les grandeurs motrices gouvernant la nucléation et la croissance des fissures à l'échelle microstructurale. Ces indicateurs, sensibles à la microstructure, permettent d'analyser les effets locaux des champs mécaniques sur les mécanismes d'endommagement. Ils peuvent être corrélés à la durée de vie en fatigue (nombre de cycles à rupture) au moyen de lois empiriques (McDowell & Dunne, 2010).

Au fils du temps, de nombreuses études ont été consacrées au développement et à l'application des FIPs. McDowell et Dunne (McDowell & Dunne, 2010) ont mené des simulations de plasticité cristalline sur différents matériaux (alliages de Ni,Ti, aciers), en utilisant des FIPs basées sur la déformation plastique cumulé et le critère de Fatemi-Socie (Fatemi & Socie, 1988) tout en proposant une approche probabiliste basée sur une distribution de Gumbel. Przybyla et al. (Przybyla et al., 2013) ont étudié la fatigue à grand et très grand nombre de cycles à travers des modèles statistiques permettant d'identifier l'effet des entailles et des caractéristiques microstructurales sur l'amorçage des fissures. Hor et al. (Hor et al., 2014) ont exploré les effets de chargement multiaxiaux en utilisant une approche de plasticité cristalline. Castelluccio et McDowell (Castelluccio & McDowell, 2015) ont montré que le moyennage des FIP sur les grains permettait de réduire la sensibilité au maillage, bien qu'au prix d'une perte d'information sur la variabilité intra-granulaire. Briffod et al. (Briffod et al., 2016) ont étudié la formation de fissures pour le Fe-α, en utilisant la procédure de Tanaka-Mura (Tanaka & Mura, 1981) pour évaluer l'impact du niveau de contrainte sur la morphologie des fissures et la durée de vie d'amorçage des fissures. Yuan et al. (Yuan et al., 2020) ont travaillé avec la fatigue oligocyclique et ont mis en évidence, pour un alliage GH4169, une concentration de la dissipation et du glissement plastique aux joints de grains et aux points triples. Schäfer et al. (Schäfer et al., 2019) ont comparé plusieurs critères pour un matériau martensitique, en montrant la supériorité du critère de Fatemi–Socie sur ceux basés sur la dissipation ou la déformation plastique seule. Stopka et al. (Stopka et al., 2022) ont souligné l'importance des interactions intergranulaires dans un alliage d'aluminium 7075-T6, montrant que la distribution des FIP dépend fortement de la taille du VER et du voisinage. Durmaz et al. (Durmaz et al., 2022) ont quant à eux comparé les cartes de FIP issues de simulations avec les observations micrographiques sur un acier ferritique (EN 1.4003), montrant leur pertinence pour localiser les zones critiques. Li et al. (Y. Li et al., 2023) en s'appuyant sur une microstructure réelle d'un alliage de titane, ont montré que l'indicateur basé sur le glissement plastique cumulé était plus prédictif de la fatigue LCF que celui fondé sur la dissipation. Enfin, Gu et al. (Gu et al., 2023) ont démontré, à travers des simulations sur le Ti-6Al-4V, que les FIPs maximaux et la durée de vie à l'initiation étaient fortement influencée par la texture cristallographique et la taille des échantillons.

3.4.2. FIP basée sur le glissement cumulé ($\Delta\boldsymbol{\nu}$)

Inspiré par la recherche bibliographique menée, les indicateurs de fatigue basée sur le glissement cumulé, la dissipation et le critère de Fatemi-Socie sont de possibles candidats pour l'analyse en question. Le choix pris dans ce travail a été basé sur le glissement maximale plastique cumulé par zone ($\Delta\nu_{zone,max}$). Il est défini par l'équation suivante

$$FIP = \Delta\nu_{zone,max} = \max_{VER}\left(\int_{cycle}\sum_{s=1}^{n^s} |\dot{\gamma}^s_{zone}(t)|dt\right) \quad (92)$$

avec n^s le nombre de systèmes de glissement considérés dans la zone, et $\dot{\gamma}^s_{zone}$ le taux de glissement sur le système s dans la zone considérée.

Le glissement cumulé, comme remarqué par Sweeney et al, (Sweeney et al., 2013) peut dépendre de la discrétisation et pour réduire cette dépendance, un concept de volume physique d'analyse est introduit. Comme dans la section 3.1, les zones d'intérêt retenues ont été le voxel et le grain.

3.4.3. Évolution du glissement plastique par voxel

Pour débuter l'analyse de l'évolution du glissement plastique cumulé, une étude préliminaire a été menée sur un tirage d'orientation donné. Deux courbes distinctes ont été tracées : la première montre, pour chaque amplitude de contrainte, l'évolution du glissement plastique cumulé des dix voxels les plus plastifiés à cette même amplitude ; la seconde retrace l'évolution du glissement plastique des dix voxels identifiés comme les plus plastifiés à 90 MPa, et ce pour l'ensemble des amplitudes (Figure 59). Un schéma explicatif de la démarche retenue est montré sur la Figure 58. Une première observation évidente est que l'augmentation de l'amplitude de contrainte entraîne une intensification du glissement plastique. Une seconde remarque notable concerne le fait que le voxel le plus plastifié n'est pas nécessairement le même pour chaque amplitude : les évolutions présentées dans les Figure 59(a-b) diffèrent sensiblement. C'est dû aux effets de voisinage. Un autre point d'intérêt réside dans la vitesse d'évolution des courbes analysées qui est variable d'une courbe à l'autre. Cela se manifeste notamment par le croisement de certaines courbes, comme observé dans la Figure 59(b).

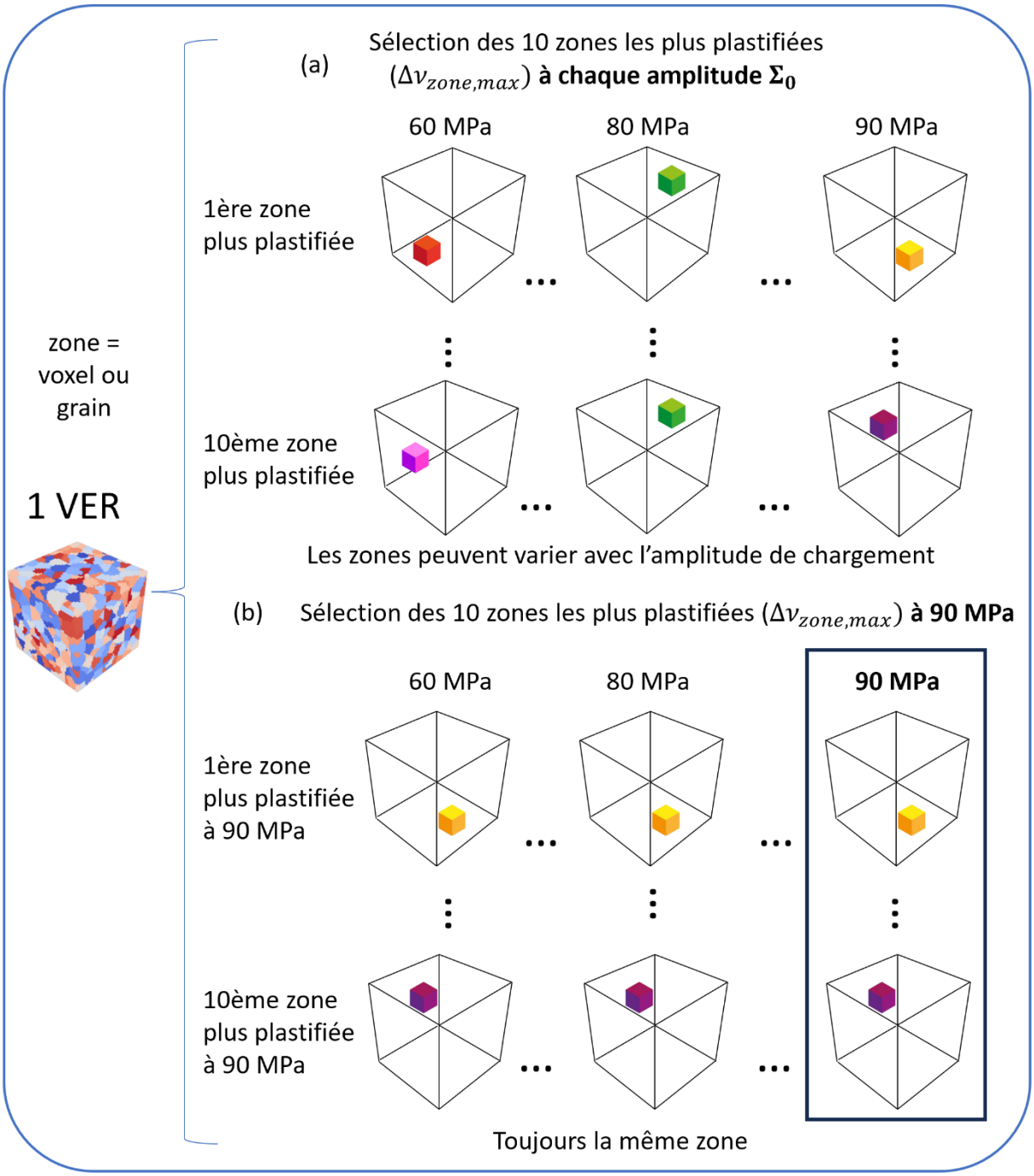


Figure 58. Schéma illustrant deux stratégies d'analyse de l'activation plastique à l'échelle du grain. (a) Pour chaque amplitude de contrainte Σ_0, les zones les plus plastifiées sont identifiées indépendamment dans le VER. La population de grains sélectionnés peut ainsi varier avec l'amplitude de chargement. (b) Les zones les plus plastifiées identifiées à Σ_0=90 MPa sont suivis pour différentes amplitudes de contrainte $\Sigma_0 \in$ [60,90] MPa, afin d'analyser l'évolution de leur activité plastique en fonction du chargement.

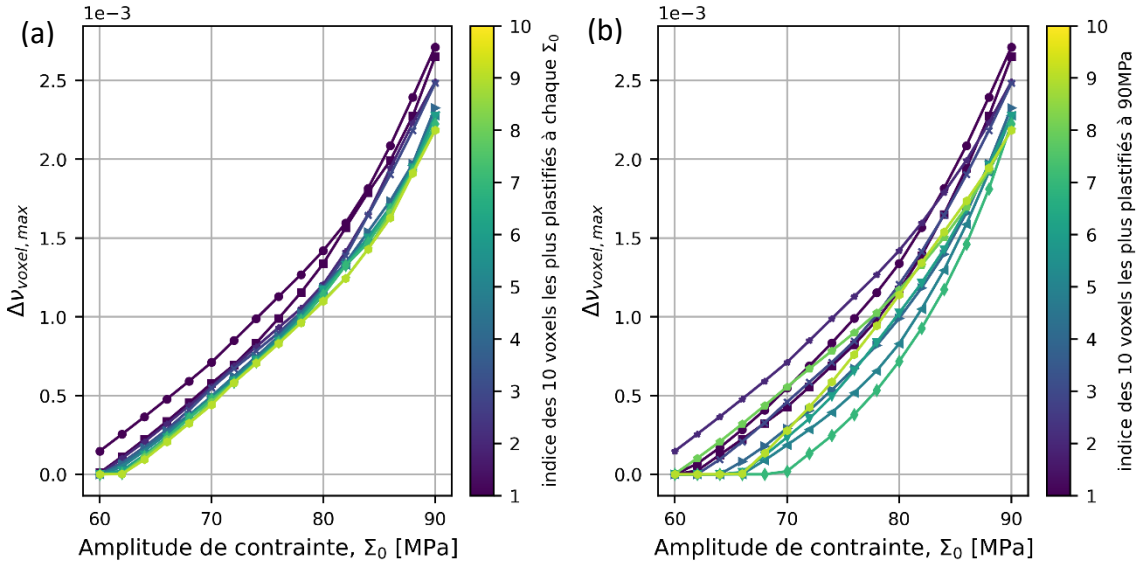


Figure 59. (a) Évolution du glissement cumulé maximal, $\Delta\nu_{voxel,max}$ (a) à chaque amplitude Σ_0 (b) à 90MPa. Sur la barre des couleurs, les 10 premiers indices des voxels plus plastifiés sont affichés.

Après avoir analysé l'évolution des dix voxels les plus plastifiés pour un tirage d'orientation donnée, l'évolution du glissement plastique maximal pour l'ensemble du volume pour ces 30 tirages et VER différents est représentée (Figure 60). Un schéma est montré sur la Figure 61.

Il est possible de voir sur la Figure 60(b) que la dispersion du glissement est plus prononcée que celle vu dans la Figure 60(a).

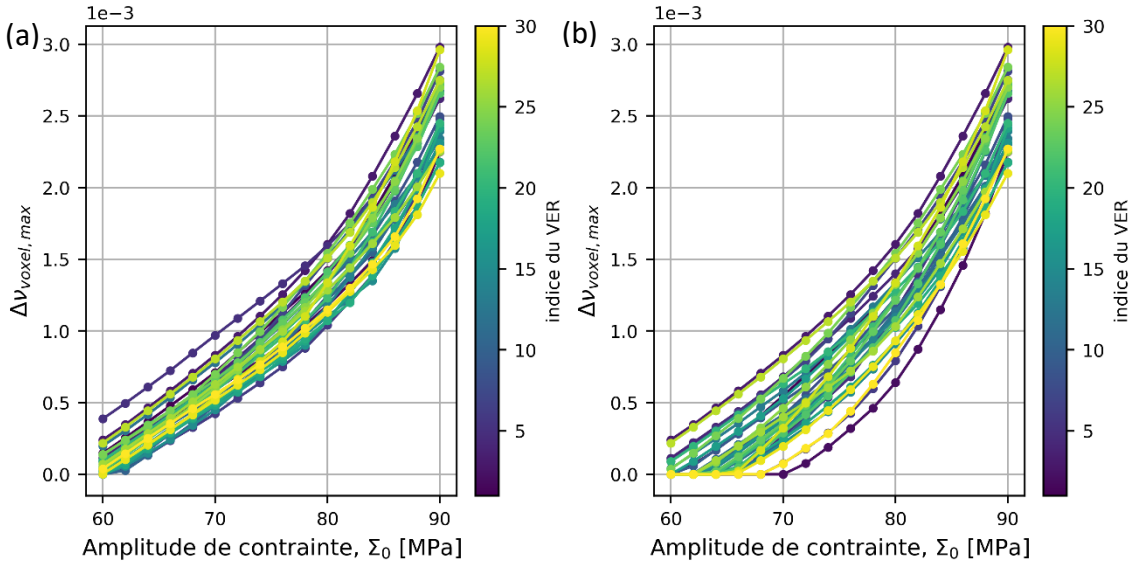


Figure 60. Évolution du glissement cumulé maximal, $\Delta\nu_{voxel,max}$ pour chaque VER (a) voxel plus plastifié à chaque Σ_0 (b)voxel plus plastifié à 90 MPa. Sur la barre de couleurs, les indices de 30 VERs sont affichés.

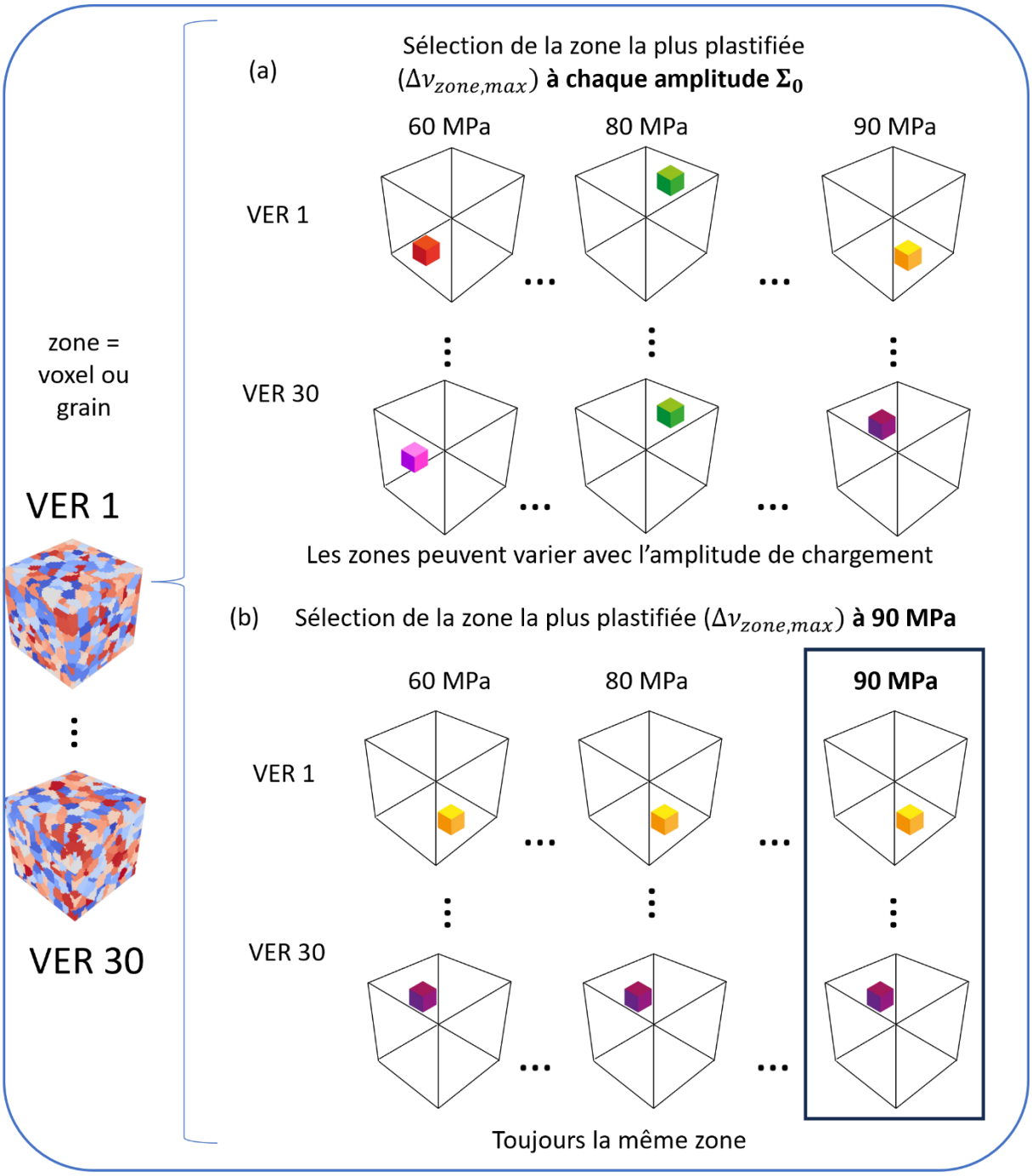


Figure 61. Schéma illustrant deux stratégies d'analyse de l'activation plastique à l'échelle du grain. (a) Pour chaque amplitude de contrainte Σ_0, les zones les plus plastifiées sont identifiées pour 30 VERs. La population de grains sélectionnés peut ainsi varier avec l'amplitude de chargement. (b) Les zones les plus plastifiées identifiées pour 30 VERs à Σ_0=90 MPa sont suivis pour différentes amplitudes de contrainte $\Sigma_0 \in$ [60,90] MPa, afin d'analyser l'évolution de leur activité plastique en fonction du chargement.

3.4.4. Évolution du glissement plastique par grain

Désormais, afin d'étudier l'influence de la zone d'analyse du glissement cumulée, une analyse à l'échelle du grain est aussi réalisée. Il est possible d'obtenir des conclusions similaires à ce qui a déjà été observé avec les voxels. Une intensification du glissement plastique est constatée lorsque l'amplitude de la contrainte augmente, mais aussi que le grain le plus

plastifié n'est pas nécessairement le même pour chaque niveau de chargement, comme l'illustrent les Figure 62(a,b).

En ce qui concerne l'évolution des courbes analysées (Figure 63), il est possible de constater que, dans ce cas, la zone d'analyse par grain, plus étendue que celle définie par voxel, induit une dispersion plus faible de l'évolution du glissement plastique pour chaque tirage d'orientations. Cette différence s'explique par une distribution des contraintes plus homogène à l'échelle du grain. En conséquence, l'état de contrainte est mieux réparti au sein du matériau, ce qui réduit significativement les croisements entre les courbes, contrairement à ce qui avait été observé dans la Figure 60(b) pour l'analyse par voxel.

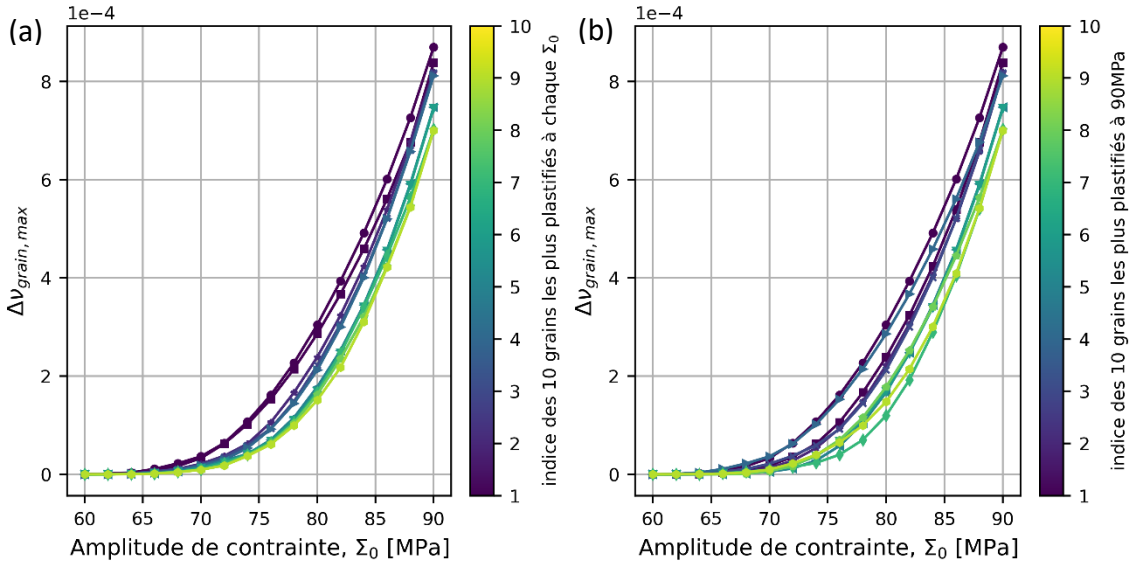


Figure 62. (a) Évolution du glissement cumulé maximal, $\Delta\nu_{grain,max}$ (a) à chaque amplitude Σ_0 (b) à 90MPa. Sur la barre des couleurs, les 10 premiers indices des grains plus plastifiés sont affichés.

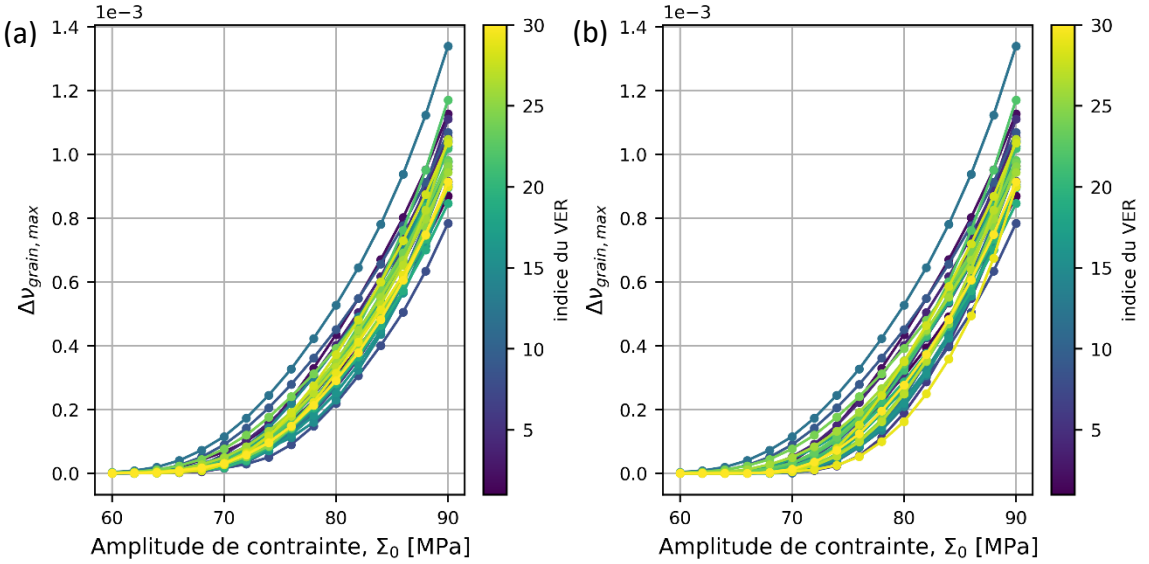


Figure 63. Évolution du glissement cumulé maximal, $\Delta\nu_{grain,max}$ pour chaque VER (a)grain plus plastifié à chaque Σ_0 (b)grain plus plastifié à 90 MPa. Sur la barre de couleurs, les indices de 30 VERs sont affichés.

3.4.5. Distribution statistique du FIP

Pour l'étude statistique du FIP, la stratégie adoptée est la suivante : à partir des évolutions du glissement plastique accumulé, aussi bien que pour l'approche par voxel que pour celle par grain, un seuil a été choisi. Ensuite l'amplitude nécessaire pour atteindre ce seuil est calculée pour chaque tirage d'orientation afin de tracer l'histogramme des amplitudes. Le protocole est illustré sur la Figure 64.

Dans la procédure décrite sur la Figure 64, 30 agrégats présentant des tirages d'orientations différents sont soumis à des chargements uniaxiaux pour des amplitudes comprises entre 60 MPa et 90 MPa. Pour chaque VER, l'évolution du $\Delta v_{zone,max}$ de la zone la plus critique, c'est-à-dire celle présentant la valeur maximale à chaque amplitude, est tracée. L'objectif est alors de choisir un seuil $\Delta v_{zone_{off}}$ caractérisant le début de l'activité plastique, conformément aux critères présentés dans la section 3.1. Pour chaque VER et pour ce seuil, la valeur de Σ_{off} est déterminée. À partir de l'ensemble des Σ_{off} obtenus pour les 30 agrégats, une loi de Weibull (Weibull, 1951) est ensuite ajustée.

Pour l'approche par voxel, l'histogramme des amplitudes est présenté dans la Figure 65, pour les valeurs de seuil comprises entre 5×10^{-4} à 1×10^{-3}. En ajustant la distribution selon la loi de Weibull, il est possible trouver des valeurs de m qui peuvent varier de 41 à 43. Pour l'approche par grain, la Figure 66 montre que, pour des seuils compris entre 1×10^{-5} à 2×10^{-4}, la valeur de m reste entre 53 à 63.

Les valeurs élevées du paramètre m indiquent une faible dispersion du glissement plastique, aussi bien dans l'approche par voxel que par grain.

Pour l'approche par voxel, il est ainsi possible d'établir un lien cohérent entre la pente obtenue lors de l'analyse du nombre de voxels plastifiés en échelle logarithmique (sous-section 3.1.2, pour des amplitudes correspondant à environ 10 % de voxels plastifiés), celle issue de la loi de Weibull appliquée au voxel le plus sollicité, ainsi que la pente associée à la dissipation moyenne par cycle (sous-section 3.1.3, pour des amplitudes comprises entre 60 et 66 MPa). Ce rapprochement, bien que prometteur, reste partiellement achevé, dans la mesure où les valeurs de m obtenues par simulation sont hors du domaine expérimentalement observé (généralement comprise entre 10 et 30)(Munier et al., 2014).

Pour l'approche par grain, un lien similaire peut être établi entre le nombre de grains plastifiés et la dissipation moyenne (avec des valeurs de m proches de 45 pour des amplitudes correspondant à environ 10 % de grains plastifiés). En revanche, le rapprochement avec la loi de Weibull n'est pas satisfaisant, les valeurs simulées de m se situant entre 53 et 63, soit au-delà des plages expérimentales usuelles.

Cette divergence suggère la nécessité d'introduire un facteur supplémentaire permettant d'accroître la dispersion des réponses locales afin de mieux reproduire les comportements observés expérimentalement et une échelle intermédiaire d'analyse.

Ainsi, dans le chapitre suivant, une distribution normale de la contrainte de cisaillement critique sera introduite à l'intérieur de chaque grain. Cette approche vise à accroître la variabilité intergranulaire, à mieux représenter la formation des bandes de glissement et à établir un lien plus direct entre les dispersions simulées et celles mesurées expérimentalement.

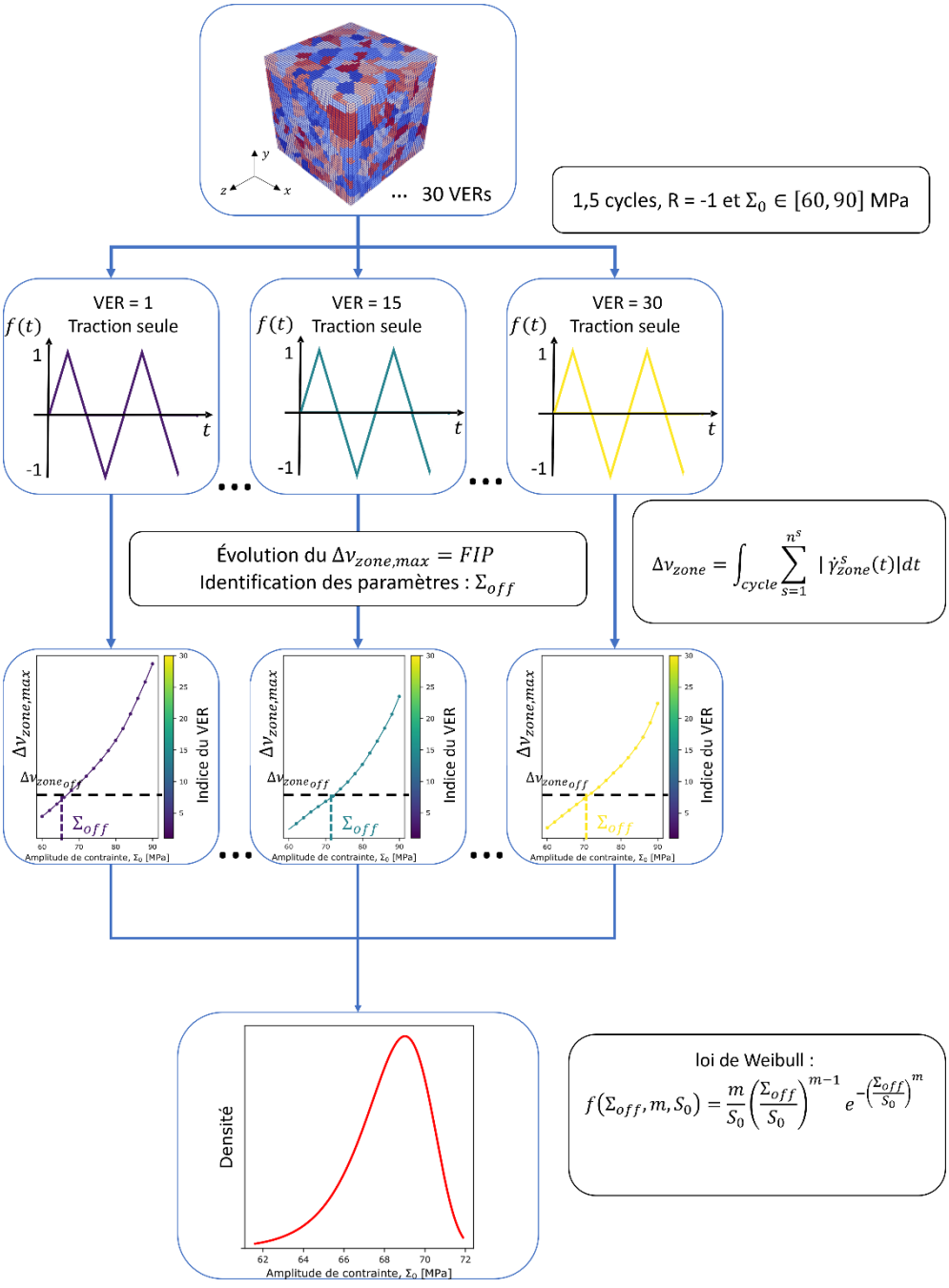


Figure 64. Protocole de la distribution statistique du FIP

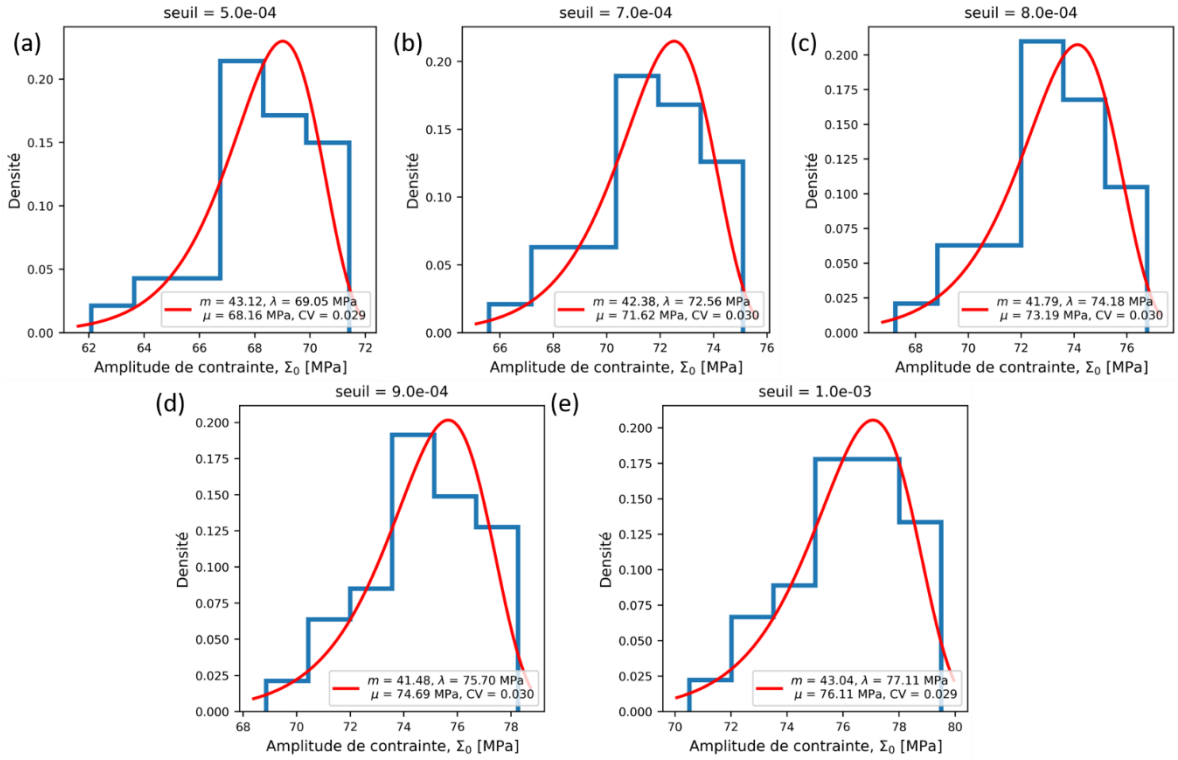


Figure 65. Distribution de l'amplitude nécessaire à l'activation plastique, selon l'approche par voxel pour des seuils compris entre 5×10^{-4} et 1×10^{-3}.Les paramètres m et λ correspondent aux paramètres de la loi d'ajustement de Weibull. μ représente la moyenne et CV, le coefficient de variation.

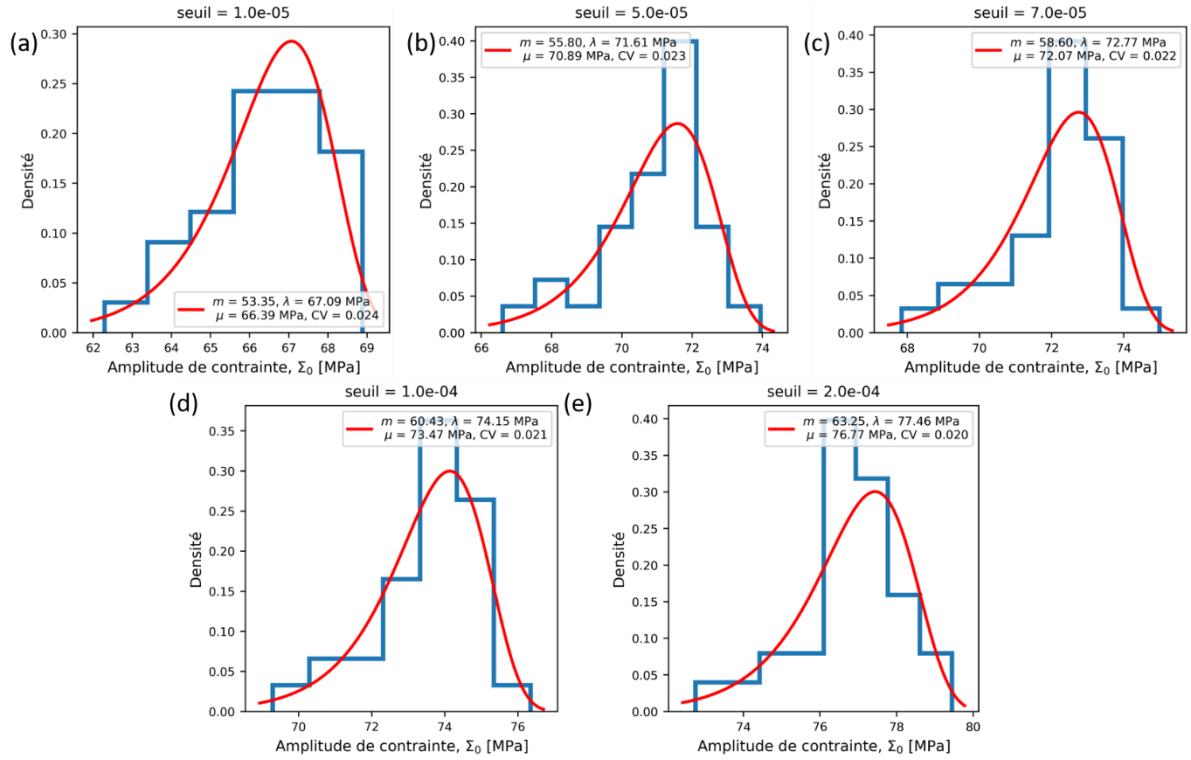


Figure 66. Distribution de l'amplitude nécessaire à l'activation plastique, selon l'approche par grain pour des seuils compris entre 1×10^{-5} et 2×10^{-4}.Les paramètres m et λ correspondent aux paramètres de la loi d'ajustement de Weibull. μ représente la moyenne et CV, le coefficient de variation.

3.5. Conclusion

À partir de l'étude du comportement d'un agrégat polycristallin soumis à un chargement cyclique de faible amplitude, il a été possible de mettre en évidence l'importance de certains facteurs d'influence sur les champs de contrainte et sur la dissipation intrinsèque du matériau :

1. La microplasticité apparaît de manière localisée et progressive en fonction de l'amplitude des contraintes. Cela correspond bien au scénario considéré dans le cadre du modèle probabiliste à deux échelles (utilisation d'un P.P.P.).
2. L'évolution de la dissipation moyenne par cycle est similaire au deuxième régime des courbes d'auto-échauffement. Néanmoins, la présence d'une légère courbure influence les valeurs de la pente déterminée (ou de la puissance si une telle loi est considérée pour décrire la courbe d'évolution de la dissipation cyclique moyenne en fonction de l'amplitude du chargement).
3. En revanche, il n'a pas été possible de définir une taille de zone d'analyse correspondant aux sites tels que décrit dans le P.P.P. du modèle probabiliste à deux échelles introduit au chapitre 1. Les sites ne peuvent être assimilés ni aux grains, ni aux voxels, car dans les deux cas les valeurs de la puissance obtenues pour décrire l'activation des sites n'est pas en adéquation avec celle obtenue pour l'évolution de la dissipation.
4. Les paramètres du tenseur d'élasticité influencent l'apparition de la microplasticité. Un rapport de Zener plus élevé entraîne une activation plus progressive de la microplasticité et une pente moins abrupte de la courbe de dissipation en échelle logarithmique.
5. Le paramètre de l'écrouissage cinématique linéaire a peu d'influence sur la pente de la courbe de la dissipation moyenne par cycle
6. Les chargements multiaxiaux ont été étudiés. Le concept de surfaces iso-dissipation a été introduit afin de mieux interpréter les résultats et de les comparer avec les données expérimentales de la littérature. Ces premiers résultats montrent une bonne cohérence avec les études expérimentales existantes et ouvrent des perspectives pour établir des liens avec la fatigue multiaxiale.
7. Les indicateurs de fatigue basés sur le glissement plastique ont été analysés à la fois à l'échelle du voxel et à celle du grain. Seule l'approche par voxel semble être à même de relier partiellement la dispersion en fatigue avec les courbes d'auto-échauffement. Cependant les valeurs de m ainsi estimées sont trop élevées par rapport aux résultats classiques de la littérature.

Sur la Figure 67, les comparaisons entre les pentes locales pour l'approche par voxel et par grain sont résumées. Il apparaît clairement qu'une cohérence globale entre les pentes locales pour l'approche d'activation de systèmes de glissement, pour la dissipation et pour la fatigue n'est pas encore atteinte.

Ainsi, les résultats du chapitre 3 mettent en évidence les limites d'une analyse de la microplasticité aux échelles du grain et du voxel pour établir un lien cohérent entre auto-échauffement et fatigue. Ces constats motivent l'introduction, au chapitre 4, d'une description à une échelle intermédiaire visant à mieux représenter les mécanismes d'activation plastique et leur rôle dans la dissipation.

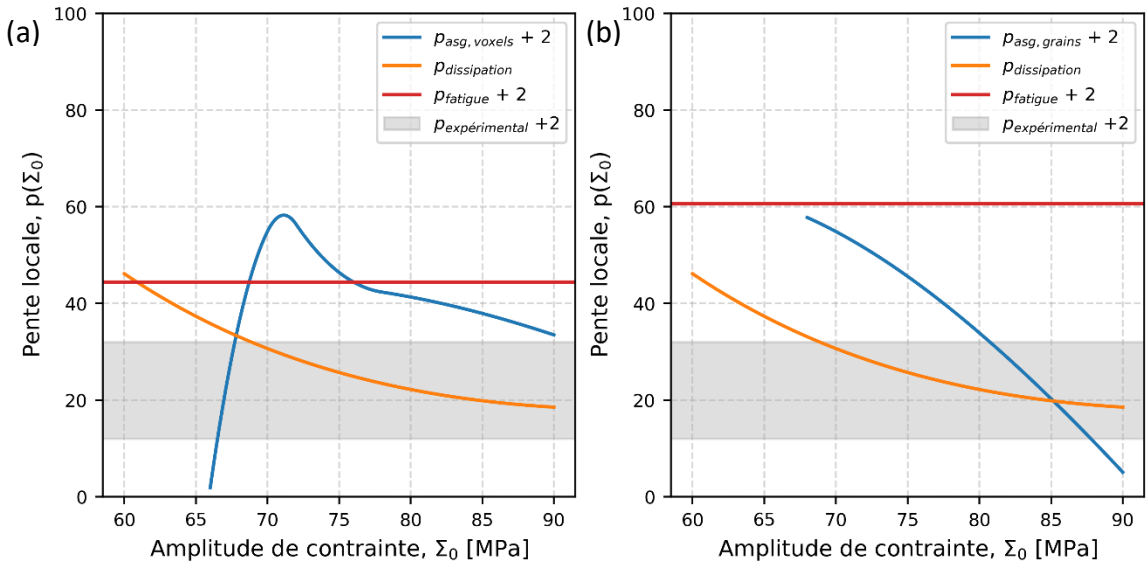


Figure 67. (a) Comparaison entre les pentes locales associées à l'activation des systèmes de glissement à l'échelle du voxel ($p_{asg,voxels}$), à la dissipation ($p_{dissipation}$) et à la dispersion en fatigue ($p_{fatigue}$), ainsi qu'à la plage de pentes expérimentales($p_{expérimental} \in [10,30]$) (Munier et al., 2014). Le seuil d'activation est fixé à 7×10^{-4}. (b) Comparaison entre les pentes locales associées à l'activation des systèmes de glissement à l'échelle du grain ($p_{asg,grains}$), à la dissipation ($p_{dissipation}$) et à la dispersion en fatigue ($p_{fatigue}$), ainsi qu'à la plage de pentes expérimentales ($p_{expérimental} \in [10,30]$) (Munier et al., 2014). Le seuil d'activation est fixé à 7×10^{-5}.

Chapitre 4 : Étude de la dissipation cyclique d'un agrégat polycristallin avec lamelles

Sommaire

4.1. Génération de lamelles dans les grains d'un agrégat polycristallin 113
4.2. Analyse de l'apparition progressive de la microplasticité 116
4.2.1. Glissement cumulé par grain et par lamelle 116
4.2.2. Influence de la contrainte cisaillement critique résolue sur la dissipation moyenne par cycle 119
4.2.3. Influence de l'épaisseur des lamelles sur la dissipation moyenne par cycle 121
4.2.4. Influence du raffinement du maillage 122
4.3. Évolution de la dissipation intrinsèque moyenne par cycle 126
4.3.1. Influence du nombre de tirage d'orientations sur l'activation du glissement plastique 126
4.3.2. Analyse de la dissipation moyenne par cycle 127
4.3.3. Conclusion intermédiaire 131
4.4. Indicateurs de Fatigue (FIP) 132
4.4.1. Évolution du glissement plastique par grain 133
4.4.2. Évolution du glissement plastique par lamelle 134
4.4.3. Distribution statistique du FIP 135
4.4.4. Influence du nombre de tirages sur la dispersion des histogrammes de fatigue d'un polycristal 137
4.5. Conclusions 138

Introduction

Dans le chapitre 3, il a été montré que l'analyse de l'évolution de la microplasticité obtenue à l'échelle des grains ou des voxels présentait certaines limites notamment vis-à-vis du lien entre la fatigue et l'auto-échauffement. Ces limites peuvent avoir plusieurs origines. La première tient au fait que la pente de l'évolution de la dissipation moyenne par cycle ne coïncide pas, au « +2 » près avec celle du scénario d'apparition de la microplasticité en échelle logarithmique. La seconde provient du fait que l'étude de la microplasticité à l'échelle du grain ou du voxel ne permet pas de faire le lien entre l'activation progressive des sites plastiques et la dispersion observée en fatigue. Motivé par ce constat, ce chapitre propose d'explorer une autre approche, modifiant la nature de l'élément de base étudié via l'introduction d'une échelle intermédiaire entre le grain et le voxel. Cette nouvelle échelle correspond à celle des lamelles, dont l'un des objectifs est de représenter les bandes de glissement apparaissant sur la surface du matériau lors du chargement cyclique (Amini, 2021; Munier et al., 2014). Cette représentation plus réaliste par bandes ou lamelles a déjà été modélisée par e.g. (Castelluccio & McDowell, 2014, 2015; Gélébart, 2021; Marano & Gélébart, 2020). L'exploration de cette nouvelle échelle d'analyse par bandes sera associée à une distribution aléatoire de la contrainte de cisaillement critique résolue (Gélébart, 2021; Marano & Gélébart, 2020). Cette approche permettra d'améliorer le lien avec le modèle probabiliste à deux échelles et d'apporter des éléments de réponse sur la signification d'un site dans le cadre du Processus Ponctuel de Poisson.

Pour réaliser la mise en œuvre des simulations avec la nouvelle zone intermédiaire, dans une première partie du chapitre 4, la génération de lamelles dans les grains de l'agrégat polycristallin est présentée. Ainsi les paramètres retenus sont justifiés pour la génération des lamelles et, plusieurs facteurs d'influence sont étudiés sur la dissipation moyenne cyclique, tels que le raffinement du maillage, la distribution de la contrainte de cisaillement critique résolue, l'influence du tirage de contrainte de cisaillement résolue, le choix de l'épaisseur des lamelles et le nombre de tirages.

La deuxième partie du chapitre est dédiée à une comparaison entre deux types d'approches (grains plastifiés et lamelles plastifiées), lors de l'analyse de l'apparition progressive de la microplasticité. Une comparaison entre la dissipation moyenne cyclique obtenue avec la méthode des lamelles et celle issue de la modélisation classique sans lamelles (cf. chapitre 3) sera également effectuée.

Enfin, en adaptant l'indicateur de de fatigue (FIP) utilisé dans le chapitre précédent, la dernière partie aborde le caractère probabiliste de l'approche. Plusieurs tirages d'orientations seront discutés afin d'alimenter le dialogue entre le modèle probabiliste à deux échelles et le modèle polycristallin.

4.1. Génération de lamelles dans les grains d'un agrégat polycristallin

Lors de la sollicitation cyclique en traction-compression d'un alliage métallique, des bandes de glissement apparaissent fréquemment à la surface des grains (Figure 68). Leur mise en évidence est essentielle, car la déformation plastique des polycristaux présente une hétérogénéité marquée, particulièrement prononcée dans les matériaux trempés ou irradiés (Marano & Gélébart, 2020; Patra & McDowell, 2016). Comme le souligne Gélébart (Gélébart, 2021), reproduire cette localisation du glissement constitue aujourd'hui l'un des principaux défis des simulations en plasticité cristalline.

L'analyse conjointe de l'activité de glissement et de la microstructure permet de mieux identifier les paramètres gouvernant l'écoulement plastique et d'améliorer la compréhension ainsi que la prévision des propriétés mécaniques des matériaux structuraux. Toutefois, quantifier finement la localisation du glissement dans les métaux polycristallins demeure complexe (Stinville et al., 2022).

Cette observation détaillée est rendue possible grâce à plusieurs techniques expérimentales. La Microscopie à Force Atomique (Franciosi et al., 2015) permet d'imager les traces de glissement avec une très haute résolution. Par ailleurs, les avancées récentes en microscopie électronique à balayage (MEB), en tomographie 3D et en analyses multimodales offrent désormais des outils puissants pour mesurer et analyser l'activité de glissement sur des surfaces de l'ordre du mm², tout en la reliant à la microstructure tridimensionnelle du matériau (Stinville et al, 2022) (Figure 68).

Ces observations expérimentales, qui mettent en lumière l'importance des bandes de glissement et de leur organisation spatiale, motivent la nécessité de représenter explicitement ces structures dans les simulations. C'est dans cette perspective que la géométrie et la discrétisation des lamelles ont été construites à l'aide du logiciel Neper.

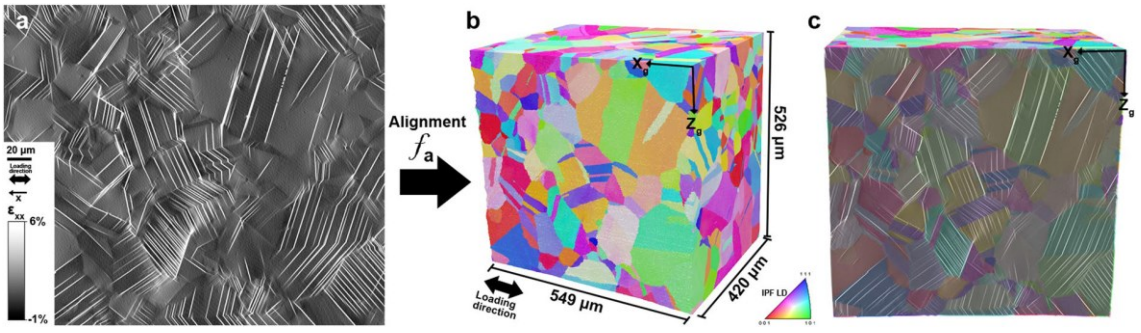


Figure 68. Corrélation entre le champ de déformation et la microstructure 3D : (a) Champ de déformation ε_{xx} issu du HR-DIC sur la zone analysée par TriBeam. (b) Fonction fa ajustant les champs DIC à la surface 3D. (c) Superposition du champ ε_{xx} sur la surface du modèle 3D (Stinville et al., 2022)

Pour construire la géométrie et la discrétisation numérique des lamelles, le logiciel Neper a été utilisé (Quey et al., 2011). La microstructure générée est telle que chaque grain est subdivisé en plusieurs zones (lamelles) parallèles, orientées selon un des systèmes de glissement ayant la plus forte probabilité d'être activé, c'est-à-dire, celui associé au facteur de Schmid (FS) maximal (Figure 70(a)). En pratique, chaque grain du VER étudié comporte 24 systèmes de glissement potentiels, et seul l'un des systèmes de glissement les plus sollicités a été retenu pour définir l'orientation de la lamelle, même si les autres contribuent, aussi, au glissement plastique.

Contrairement à la modélisation uniquement à l'aide de grains décrite au chapitre 3, chaque lamelle se voit attribuer le repère cristallin du grain avec une loi de comportement identique mais avec une contrainte de cisaillement critique résolue (τ_i^0) aléatoire, tirée d'une loi normale de moyenne $\widetilde{\tau_i^0}$ de 40 MPa et d'un coefficient de variation CV = 0,05 (Figure 70(c)). Ainsi, l'activation du glissement plastique est décrite, pour l'ensemble des plans de glissement s, par la fonction seuil d'élasticité suivante

$$f^s = |\tau^s - x^s| - \tau_i^0 \leq 0. \tag{93}$$

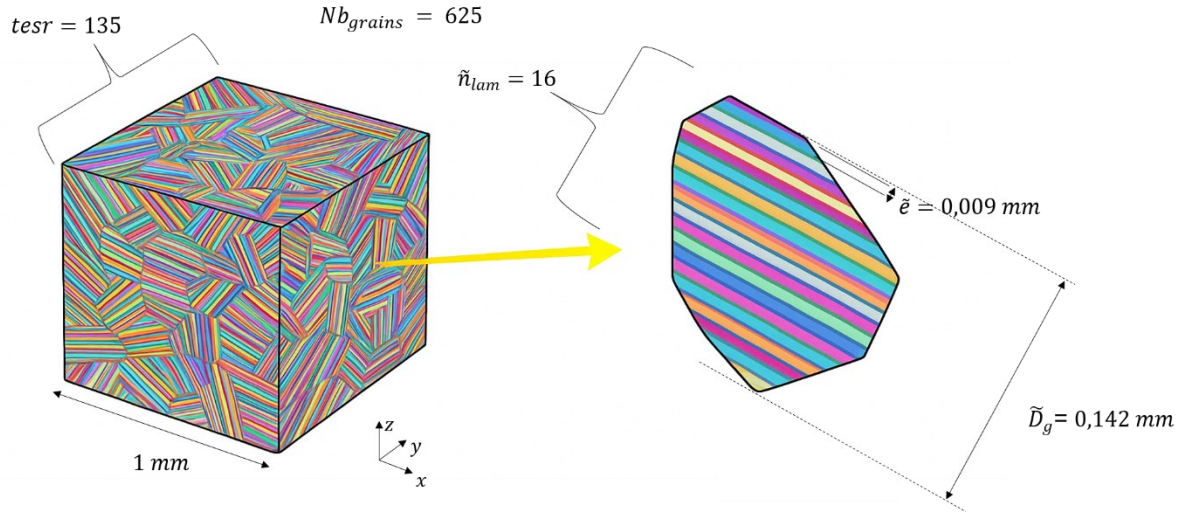


Figure 69. Schéma de l'agrégat polycristallin avec 625 grains et les paramètres géométriques

Les paramètres géométriques retenus (Figure 69) sont :

- Taille moyenne du grain, $\widetilde{D}_g$ = 0,142 mm ;
- Épaisseur moyenne des lamelles, $\tilde{e}$ = 0,009 mm ;
- Nombre de voxels par arête de l'agrégat, $tesr$ = 135 ;
- Nombre de grains, Nb_{grains} = 625 ;
- Nombre moyen de lamelles par grain, $\tilde{n}_{lam}$ = 16 ;
- Nombre moyen de voxels par grain = 3 937 ;
- Nombre moyen de voxels par épaisseur de lamelle, $a = 1\ voxel$.

Il est important de souligner que le choix de ces paramètres est cohérent avec les travaux présents dans la littérature. Par exemple, Castelluccio et McDowell (Castelluccio & McDowell, 2014, 2015) ont modélisé ces bandes (lamelles) en utilisant un nombre moyen d'éléments dans l'épaisseur de lamelle égal à 1. Il est également nécessaire de justifier le choix de l'épaisseur de lamelles, qui a été basée sur les valeurs de Castelluccio et McDowell (Castelluccio & McDowell, 2015). Ils ont analysé plusieurs microstructures avec des épaisseurs de bande comprises entre 0,002 mm et 0,009 mm. Selon ces auteurs, cette valeur ne doit pas être inférieur à l'échelle intrinsèque imposée par les structures de dislocations, typiquement comprises entre 100 nm et 2 µm.

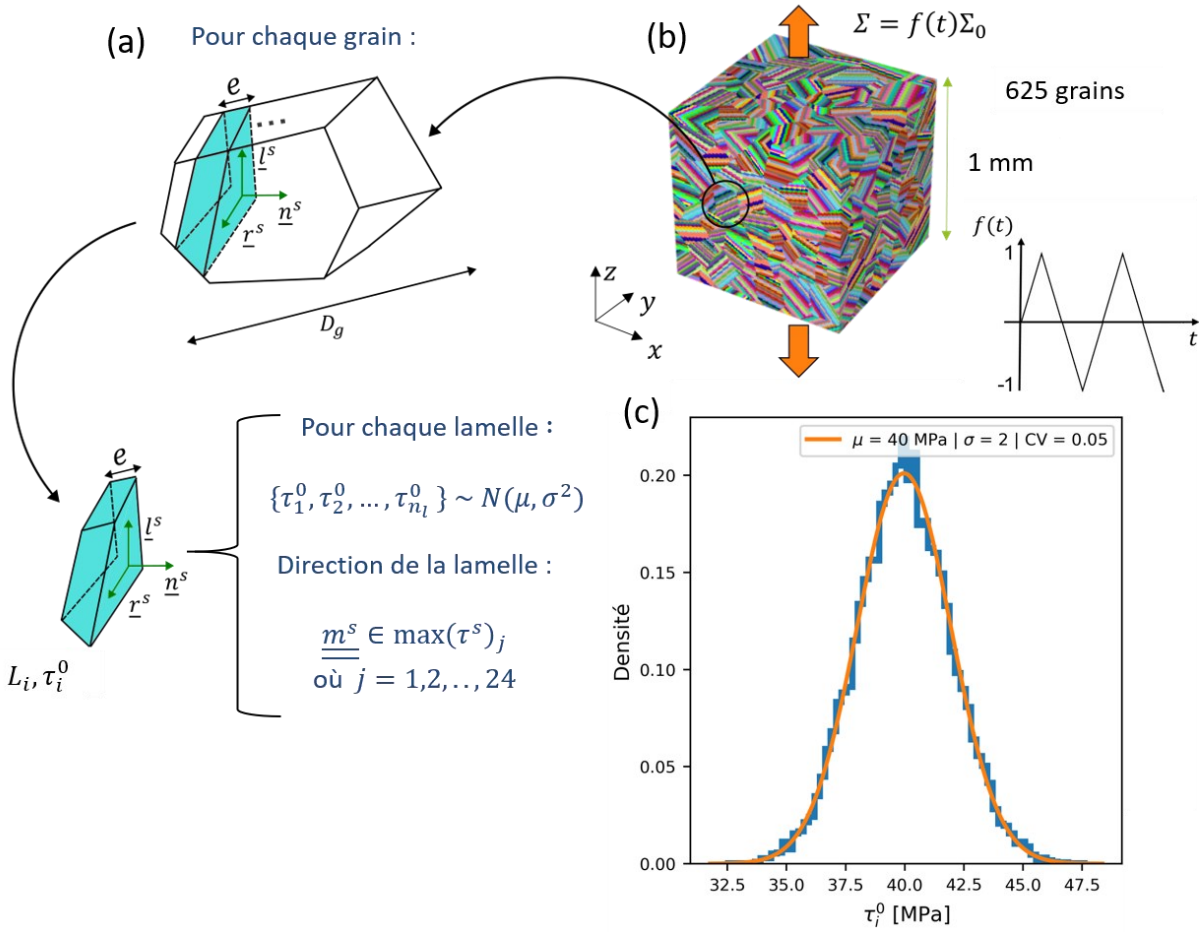


Figure 70. (a) Schéma explicatif sur le choix d'orientation des lamelles pour chaque grain, (b) exemple d'un agrégat polycristallin avec 625 grains et son chargement à partir de la modélisation par lamelles et (c) distribution de la contrainte de cisaillement critique résolue pour un tirage d'orientation.

Par rapport aux conditions limites, la génération des lamelles perturbe la périodicité géométrique, dans le post-traitement, les grains et lamelles ayant une face commune avec les surfaces extérieures du VER seront exclus de l'analyse. Les conditions aux limites imposées sont périodiques, et le chargement appliqué est 1,5 cycles de traction-compression de rapport de charge R = -1, fréquence f = 0,25 Hz avec une amplitude de contrainte Σ_0 (Figure 70(b)).

Enfin, l'introduction d'une contrainte de cisaillement critique résolue (τ_i^0) aléatoire n'est pas sans précédent. Elle a déjà été exploitée dans des simulations visant à analyser les

effets d'échelle dans des alliages irradiés (Gélébart, 2021; Marano & Gélébart, 2020). Cette approche trouve également son inspiration dans les observations expérimentales, notamment les essais sur micro-piliers, qui montrent clairement que la contrainte de cisaillement critique n'est pas constante (Bednarczyk et al., 2023; El-Awady et al., 2009; Rogne & Thaulow, 2014).

4.2. Analyse de l'apparition progressive de la microplasticité

4.2.1. Glissement cumulé par grain et par lamelle

La méthodologie appliquée ici reprend le principe de moyennage par grain introduit précédemment (cf. chapitre 3), en l'adaptant au cas de la microstructure avec lamelles. Une particularité de cette approche réside dans la limitation géométrique imposée par Neper : il n'est pas possible de générer une structure strictement périodique à base de lamelles. Par conséquent, les grains situés en bordure du VER ont été exclus de l'analyse du glissement plastique afin d'éviter les effets de bord, comme discuté précédemment.

Pour illustrer ces modifications, un sous-ensemble de l'agrégat, noté VER^* est défini après suppression des grains de surface (i.e. tous les grains qui ont une face commune avec la frontière du VER). Le glissement plastique cumulé dans un grain Δv_{grain} est alors calculé sur un cycle selon la relation suivante :

$$\forall\, grain \in VER^*\,,\ \Delta v_{grain} = \frac{1}{V_{grain}} \int \Delta v_{voxel} dv. \tag{94}$$

Pour déterminer dans quels grains la déformation plastique apparaît, une variable binaire, $\delta(x)$, est considérée. Cette variable analyse la variation cumulée du glissement plastique Δv_{grain} sur un cycle complet dans chaque grain du maillage :

$$\delta(x) = \begin{cases} 1, & si\ \Delta v_{grain} \geq seuil_{grain}\ (grain\ plastifié) \\ 0, & si\ \Delta v_{grain} < seuil_{grain}\ (grain\ élastique) \end{cases}. \tag{95}$$

Le $seuil_{grain}$ de 7×10^{-5} a été retenu afin de garantir que l'activation des premiers grain plastifiés intervienne à une amplitude d'environ 74 MPa, valeur cohérente avec celle obtenue pour l'approche par grains du chapitre précédent.

Les résultats de la Figure 71(a,b) montrent une croissance progressive du nombre de grains plastifiés avec l'amplitude de chargement, confirmant les tendances observées dans les chapitres précédents. L'évolution de la pente locale $p(\Sigma_0)$, présentée en Figure 71(c), met en évidence une décroissance continue entre 74 et 90 MPa, atteignant une valeur minimale proche de 10 pour les amplitudes les plus élevées. Cette diminution traduit un ralentissement progressif du rythme d'activation des grains, signe d'un régime stabilisé associé à un volume plastifié déjà conséquent. Un ajustement linéaire sur la plage 74–78 MPa (correspondant à

environ 0–8 % de volume plastifié) conduit à une pente moyenne de 40, confirmant la transition progressive vers un état plastique stabilisé.

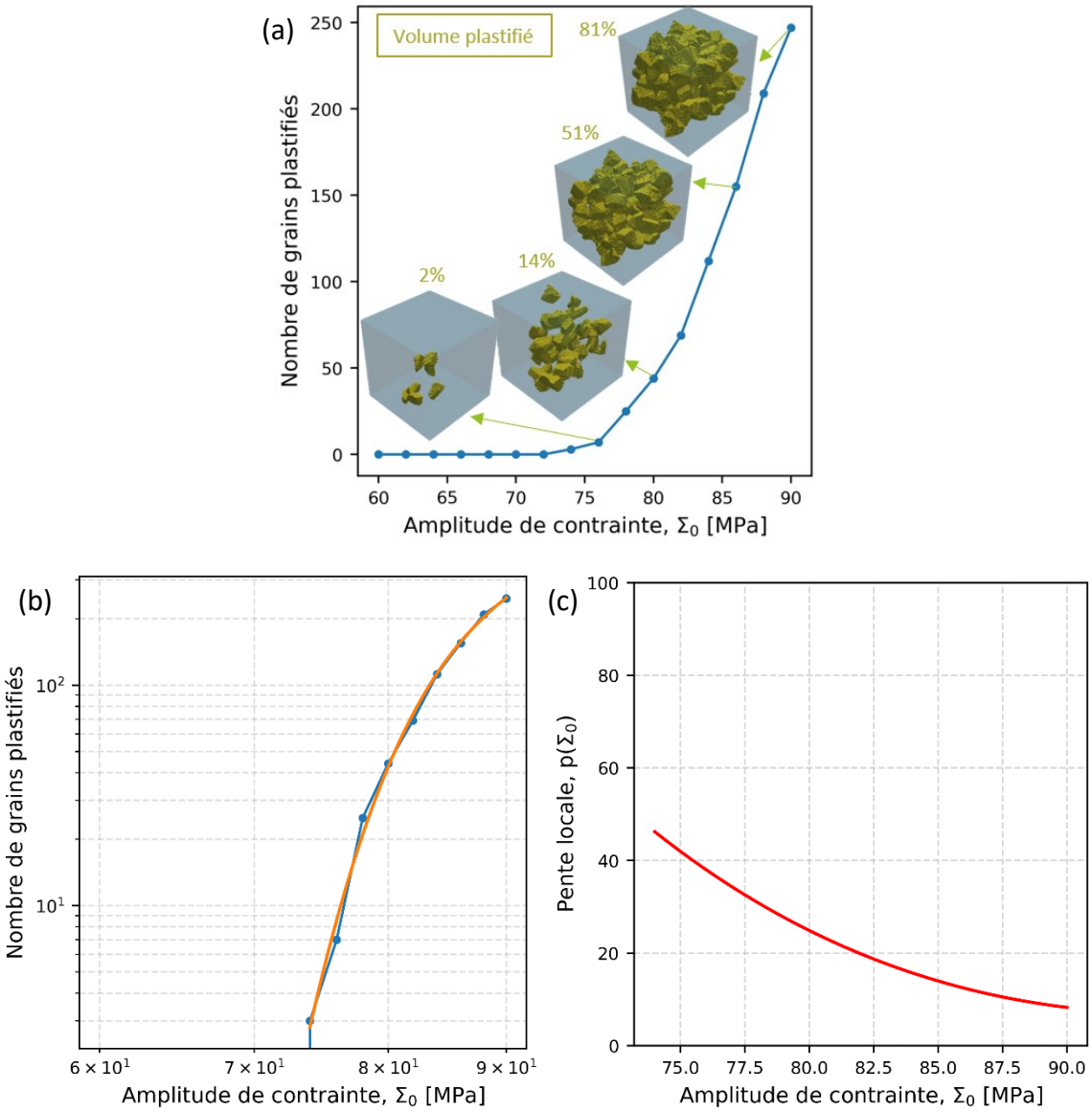


Figure 71. (a) Répartition des grains plastifiés pour un seuil de 7×10^{-5} à la fin d'un cycle : grains plastifiés en jaune, grains élastiques en vert. (b) Évolution du nombre de grains plastifiés en échelle logarithmique avec un ajustement par spline. (c) Évolution de la pente locale pour un tirage d'orientation et de tessellation donné.

Après l'analyse conduite à l'échelle du grain, une zone intermédiaire entre le grain et le voxel a été considérée : la zone par lamelle. De façon analogue à ce qui a été réalisé avant, les lamelles sur les bords ont été exclus, et une un autre sous-ensemble, noté VER^{**}, est défini après suppression des lamelles de surface (i.e. toutes les lamelles qui intersectent la frontière du VER). Le glissement plastique accumulé dans une lamelle, $\Delta v_{lamelle}$, est alors calculé sur un cycle à partir de la formule suivante :

$$\forall\ lamelle \in VER^{**},\ \Delta v_{lamelle} = \frac{1}{V_{lamelle}} \int \Delta v_{voxel} dv. \qquad (96)$$

Pour identifier les lamelles plastifiées, une variable binaire, $\delta(x)$, est introduite, permettant d'évaluer la variation cumulée du glissement plastique $\Delta v_{lamelle}$ sur un cycle complet dans chaque lamelle du maillage :

$$\delta(x) = \begin{cases} 1, & si\ \Delta v_{lamelle} \geq seuil_{lamelle}\ (lamelle\ plastifieé) \\ 0, & si\ \Delta v_{lamelle} < seuil_{lamelle}\ (lamelle\ élastique) \end{cases}. \quad (97)$$

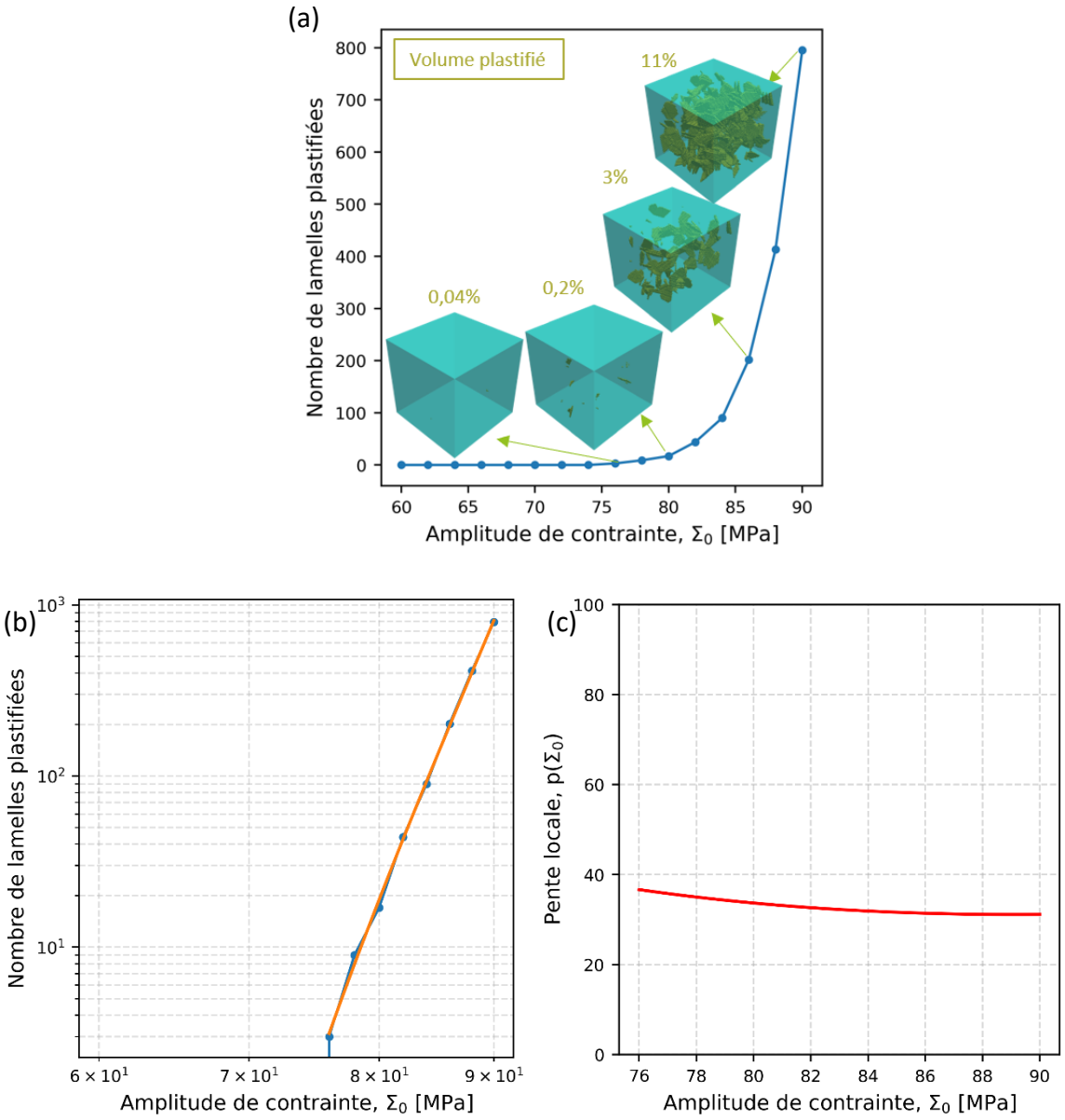


Figure 72. (a) Lamelles plastifiées pour un seuil = 7×10^{-4} à la fin du 1er cycle. Lamelles plastifiées en jaune et voxels élastiques en vert et (b) Lamelles plastifiées dans l'échelle logarithmique. La ligne orange en pointillé représente l'ajustement linéaire entre 76 MPa et 90 MPa. (c) Évolution de la pente locale pour un tirage d'orientation et de tessellation donné

Le $seuil_{lamelle} = 7 \times 10^{-4}$ a été choisi en adoptant la méthodologie considérée pour les voxels dans le chapitre précédent, conduisant à avoir un volume plastifié d'environ 10% pour l'amplitude la plus élevée, c'est-à-dire 90 MPa.

La Figure 72(a) illustre les lamelles plastifiées pour un tirage d'orientation aléatoire. Il est observé que le nombre de lamelles plastifiées croît avec l'amplitude de chargement : plus cette dernière est élevée, plus la proportion de zones plastiques croît, conformément aux tendances observées avec les approches voxel et grains présentés au chapitre 3.

La représentation en échelle logarithmique (Figure 72(b)), met en évidence une très faible courbure de l'évolution. La pente varie peu pour la plage d'amplitude considérée, à savoir dans l'intervalle 76 – 90 MPa, et possède une valeur moyenne de 33. Il est important de noter sur la Figure 72(c) que la pente locale, $p(\Sigma_0)$ reste quasi constante, indiquant que le modèle tend vers un comportement linéaire à l'échelle logarithmique, correspondant à une loi de puissance en échelle linéaire. Ce résultat est plus en adéquation avec l'hypothèse d'une densité de sites actifs en loi puissance du modèle probabiliste à deux échelles.

Dans la prochaine section, une étude des facteurs d'influence suivantes sont réalisés comme l'influence de la dispersion et de la variabilité inter-tirages de la contrainte de cisaillement critique résolue, de l'épaisseur de lamelle et aussi du raffinement de maillage.

4.2.2. Influence de la contrainte cisaillement critique résolue sur la dissipation moyenne par cycle

Dans cette section, la sensibilité de la dissipation moyenne par cycle à la dispersion de la contrainte de cisaillement critique résolue est étudiée. La contrainte critique τ_i^0 est considérée comme une variable aléatoire distribuée par lamelle pour chaque grain, avec un coefficient de variation CV variant entre 0 et 0,2, tout en conservant une valeur moyenne $\widetilde{\tau^0}$ = 40 MPa, identique à celle utilisée au chapitre 3.

La Figure 73(c) permet d'illustrer les différentes lois considérées. La Figure 73(a) montre que plus la dispersion augmente, plus la dissipation moyenne par cycle augmente pour une même amplitude de chargement. Autrement dit, une distribution plus large des contraintes critiques facilite l'activation progressive du glissement plastique dans l'agrégat, ce qui accroît la dissipation.

À l'échelle logarithmique (Figure 73(b)), il est observé que la pente du régime secondaire décroît fortement lorsque le coefficient de variation augmente : elle passe d'environ 32 pour CV = 0 à environ 10 pour CV = 0,2. Ce résultat indique que la dispersion de τ_i^0 exerce un impact notable sur la forme de la courbe de dissipation, en particulier sur son régime secondaire. L'objectif étant ici d'avoir de la localisation des déformations plastiques dans des bandes sans impacter la physique du modèle de plasticité cristalline, il a été choisi pour la suite une valeur de CV = 0,05 (une dispersion trop élevée conduit à un comportement dominé par la distribution statistique). De plus, ce choix permet d'avoir une gamme réaliste par rapport aux résultats expérimentaux obtenus pour les alliages métalliques (Bednarczyk et al., 2023).

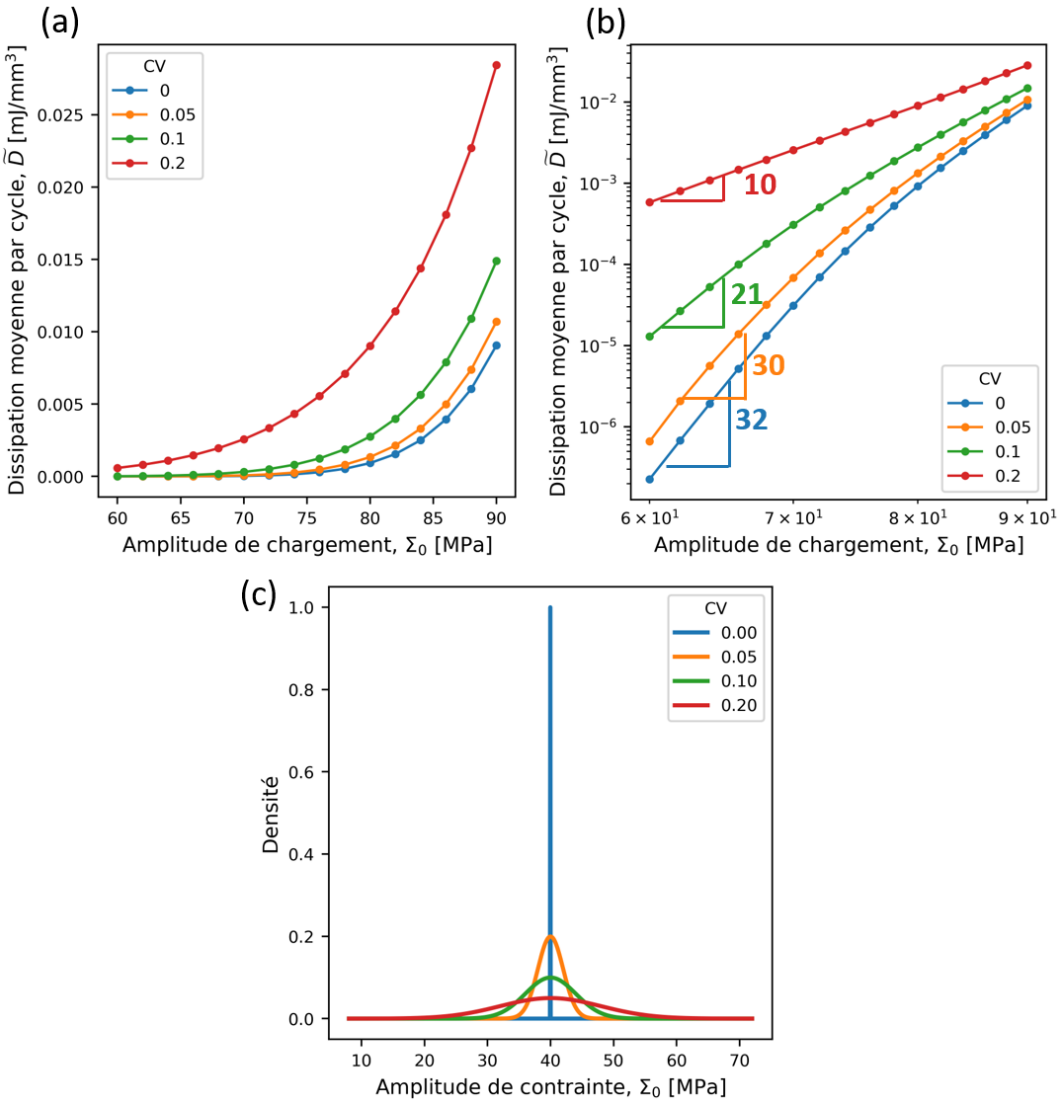


Figure 73. Évolution de la dissipation moyenne par cycle pour différents coefficients de variation CV entre 0 et 0,2 (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique. (c) Distribution de la contrainte de cisaillement résolue critique pour les CV de 0 à 0,2.

Afin d'évaluer l'effet du tirage aléatoire lui-même (et non celui de l'ampleur de la dispersion), 15 tirages indépendants de τ_i^0 ont été réalisés en fixant la dispersion à CV = 0,05.

Les résultats (Figure 74) montrent que, pour un même CV, la variabilité inter-tirages est très faible. Le coefficient de variation de la dissipation calculé sur les 15 tirages vaut seulement 0,010, ce qui confirme que la dispersion introduite par l'aléa du tirage reste marginale. Ainsi, la dissipation moyenne par cycle demeure pratiquement identique d'un tirage à l'autre. C'est pourquoi, dans l'étude, un seul tirage est considéré comme représentatif.

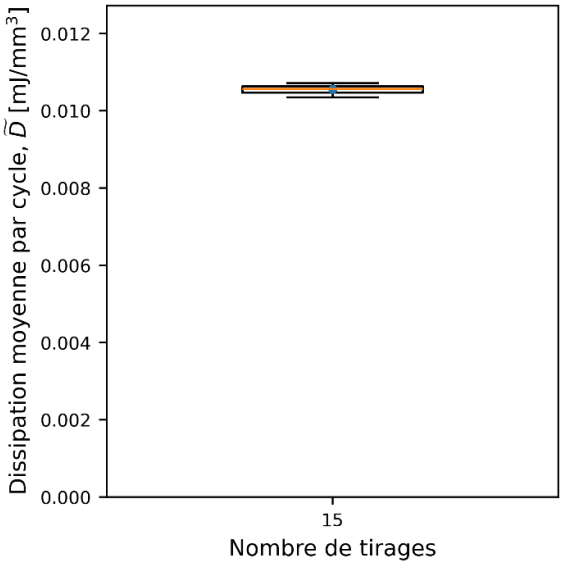


Figure 74. Dissipation par cycle pour différents tirages de contrainte de cisaillement résolue à 90 MPa.

4.2.3. Influence de l'épaisseur des lamelles sur la dissipation moyenne par cycle

Dans cette section, l'étude de l'influence de l'épaisseur de lamelle sur la dissipation moyenne par cycle a été menée pour différentes épaisseurs moyennes de lamelle comprises entre 0,009 et 0,054 mm (Tableau 4). L'évolution de la dissipation moyenne cyclique est faiblement dépendante de l'épaisseur de lamelle (Figure 75). La pente de la courbe varie légèrement : 30 pour 0,009 mm, 28 pour 0,018 mm et 31 pour 0,054 mm.

Ce comportement était attendu, compte tenu des ingrédients introduits dans la loi de comportement du modèle de plasticité cristalline utilisé. En effet, dans ce cadre la variation de l'épaisseur n'affecte pas de manière significative les mécanismes de localisation du glissement plastique lesquels restent principalement contrôlés par la distribution des contraintes de cisaillement critiques affectées aux lamelles (Figure 73).

En revanche, ce résultat contraste avec les simulations développées par (Gélébart, 2021), dans lesquelles une loi de Weibull a été introduite pour décrire la distribution de la contrainte de cisaillement critique (τ^0). Dans ce cadre, l'épaisseur des lamelles influençait davantage la réponse plastique et la dissipation associée.

Nombre de grains	volume VER (mm^3)	$\widetilde{D}_g$(mm)	$tesr$	Nombre de voxels	Nombre voxels/Nombre de grains	$\tilde{e}$ (mm)	a	$\tilde{n}_{lam}$
625	1	0,142	135	2 460 375	3937	0,054	6	3
						0,018	2	8
						0,009	1	16

Tableau 4. Paramètres pour l'étude de l'influence de l'épaisseur de lamelle

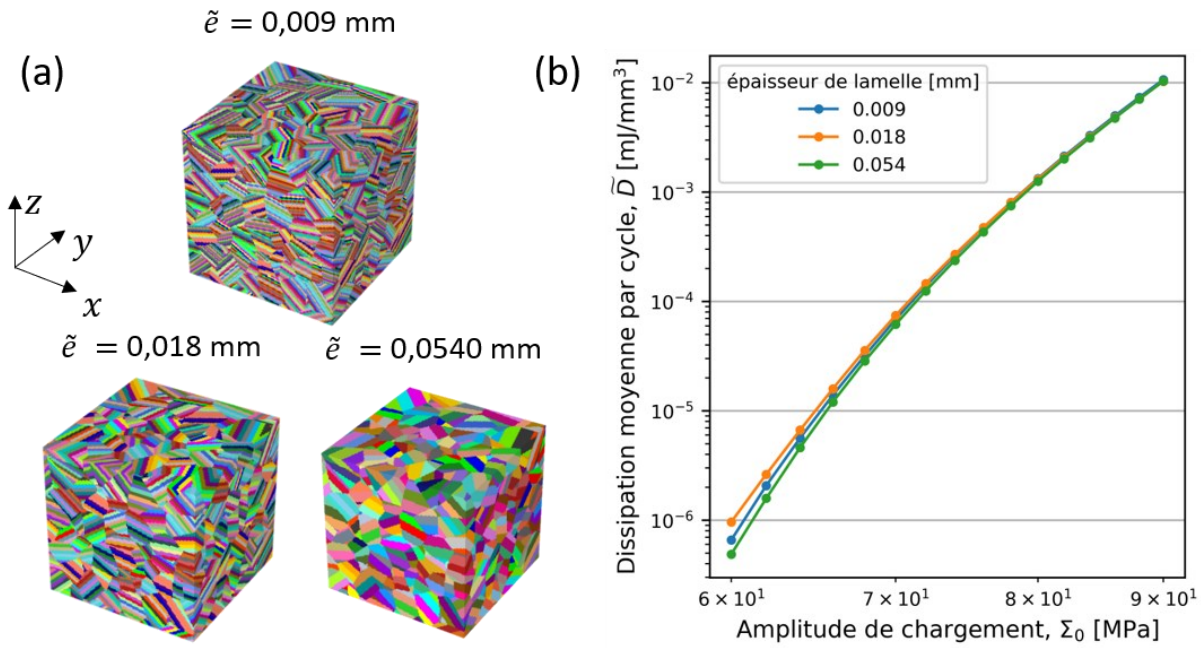


Figure 75. (a) Microstructure associée pour les différentes épaisseurs de lamelle (b) évolution de la dissipation moyenne par cycle pour différentes épaisseurs moyennes de lamelle comprises entre 0,009 à 0,054 mm en échelle logarithmique.

4.2.4. Influence du raffinement du maillage

Dans cette section, une analyse de la convergence au maillage en fonction du nombre de voxels pour représenter un agrégat polycristallin a été menée. Ces simulations constituent un complément à ceux déjà présentés au chapitre 2. Dans la Figure 76(a-c-e-g), quatre cas seront considérés. Les VERs vont avoir $33 \times 33 \times 33$ voxels, $67 \times 67 \times 67$ voxels, $135 \times 135 \times 135$ voxels et $270 \times 270 \times 270$ voxels. Une seule amplitude de contrainte a été appliquée, à savoir 90 MPa pour l'ensemble des simulations. Le Tableau 5 récapitule les paramètres associés à cette étude.

Nombre de grains	volume VER (mm^3)	$\widetilde{D}_g$ (mm)	$tesr$	Nombre de voxels	Nombre voxels/Nombre de grains	$\tilde{e}$ (mm)	a	$\tilde{n}_{lam}$
625	1	0,142	33	35 937	57	0,009	0,2	16
			67	300 763	481		0,5	
			135	2 460 375	3 937		1,0	
			270	19 683 000	31 493		2,0	

Tableau 5. Paramètres de l'étude d'influence du raffinement du maillage pour le cas avec lamelles

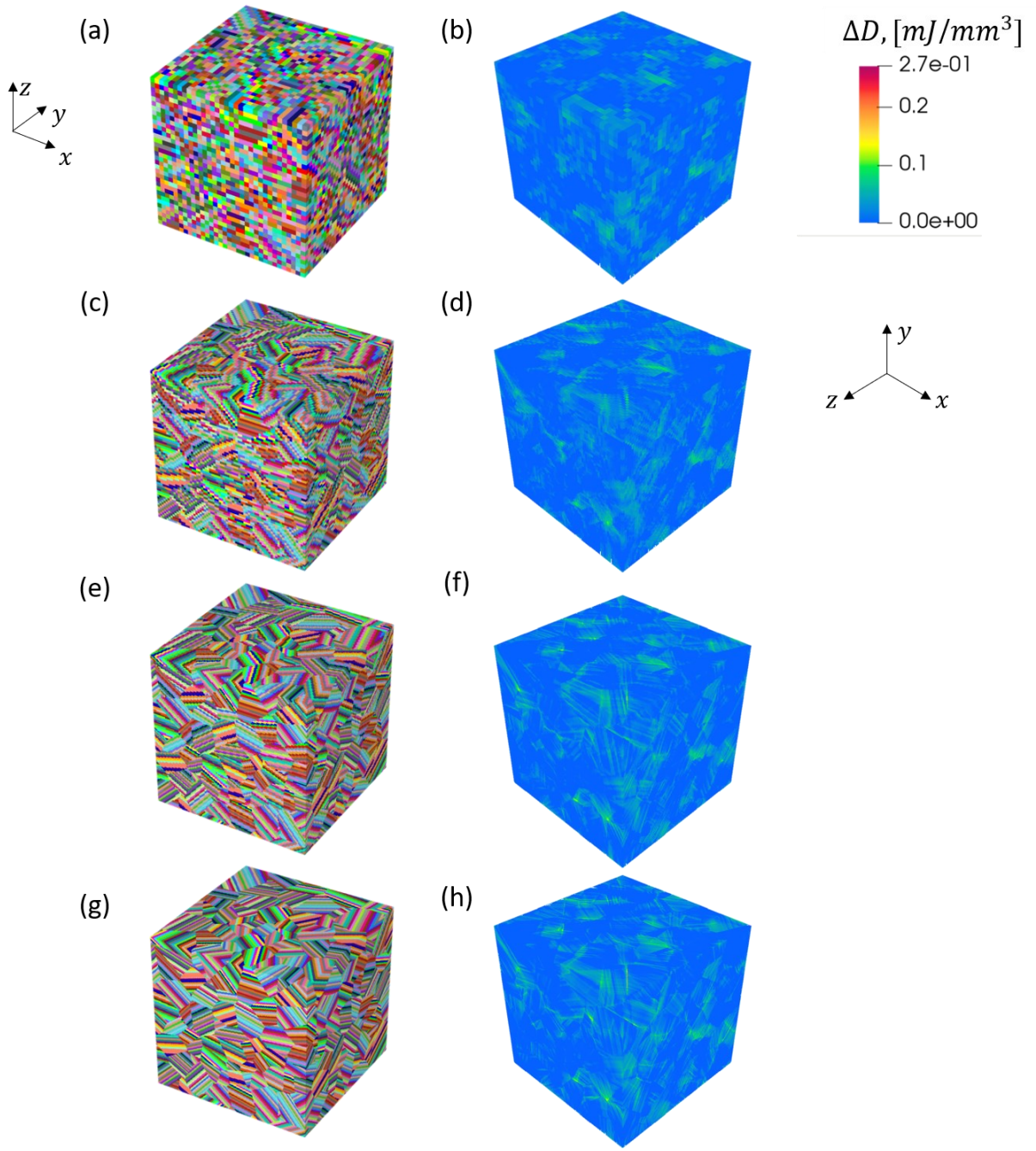


Figure 76. Différents VERs (a) 33×33×33 voxels, (c) 67×67×67 voxels, (e) 135×135×135 voxels, (g) 270×270×270 voxels. Et dissipation moyenne par cycle ΔD, associés (b-d-f-h)

En parallèle, dans la Figure 76(b-d-f-h-j), il est possible d'étudier les champs locaux de dissipation moyenne cyclique par voxel (ΔD). Il apparaît que, plus le raffinement du maillage est élevé, plus la résolution des champs locaux de dissipation est fine, ce qui permet une description plus réaliste des hétérogénéités.

Afin d'étudier plus spécifiquement l'influence du nombre de voxels sur la réponse locale, l'agrégat a été sollicité à une amplitude de 90 MPa. L'évolution des réponses locales en fonction du niveau de raffinement a alors été analysée (Figure 77). Quatre situations ont été considérées :

- L'évolution de σ_{zz} pour le grain le plus et le moins sollicité ;
- Celle de ε_{zz} pour le grain le plus et le moins sollicité.

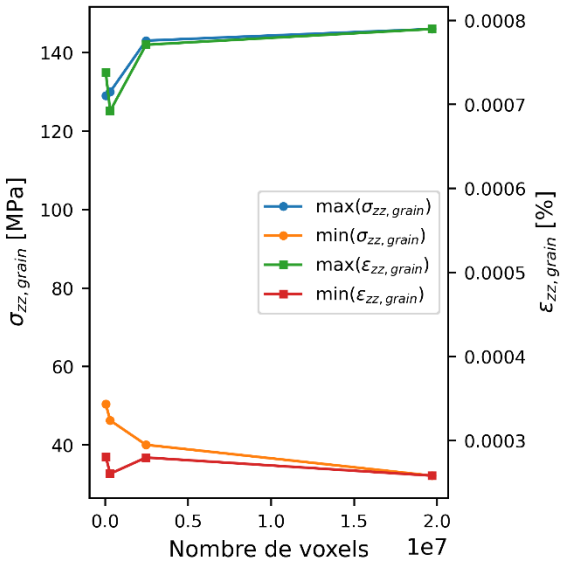


Figure 77. Évolution de $\sigma_{zz,grain}$ et $\varepsilon_{zz,grain}$ en fonction du nombre de voxels pour le grain plus/moins chargé dans la direction z à la fin du premier cycle

Pour l'ensemble des cas étudiés, il est observé que ces évolutions sont faiblement sensibles au nombre de voxels, à partir d'un maillage de 135 × 135 × 135 voxels.

Un autre aspect important concerne l'influence du maillage sur la réponse moyenne par grain. Le nuage de points présenté sur la Figure 78(a) illustre la distribution de la contrainte locale $\sigma_{zz,grain}$ et $\varepsilon_{zz,grain}$ en fonction du volume des grains pour différentes résolutions de maillage (i.e., nombre de voxels). Une forte dispersion de la contrainte et de la déformation sont observées pour les grains de petit volume, tandis que cette dispersion diminue progressivement lorsque le volume des grains augmente. Cette tendance traduit le fait que les petits grains subissent des hétérogénéités de déformation plus marquées, liées aux contraintes de compatibilité avec les grains voisins et à l'influence de leur orientation cristallographique. À l'inverse, les gros grains présentent un comportement plus homogène, car les variations locales se compensent à plus grande échelle. L'effet observé est cohérent avec les phénomènes connus en plasticité cristalline, notamment la sensibilité des contraintes locales à la taille de grain. Par ailleurs, la superposition des nuages de points correspondant aux différentes résolutions montre que la tendance physique est bien captée, indépendamment du nombre de voxels, ce qui atteste de la robustesse numérique des simulations.

Finalement, la Figure 79 montre, comme déjà vu dans le chapitre 2, que la dissipation moyenne par cycle ($\widetilde{D}$) est peu sensible au niveau de raffinement du maillage.

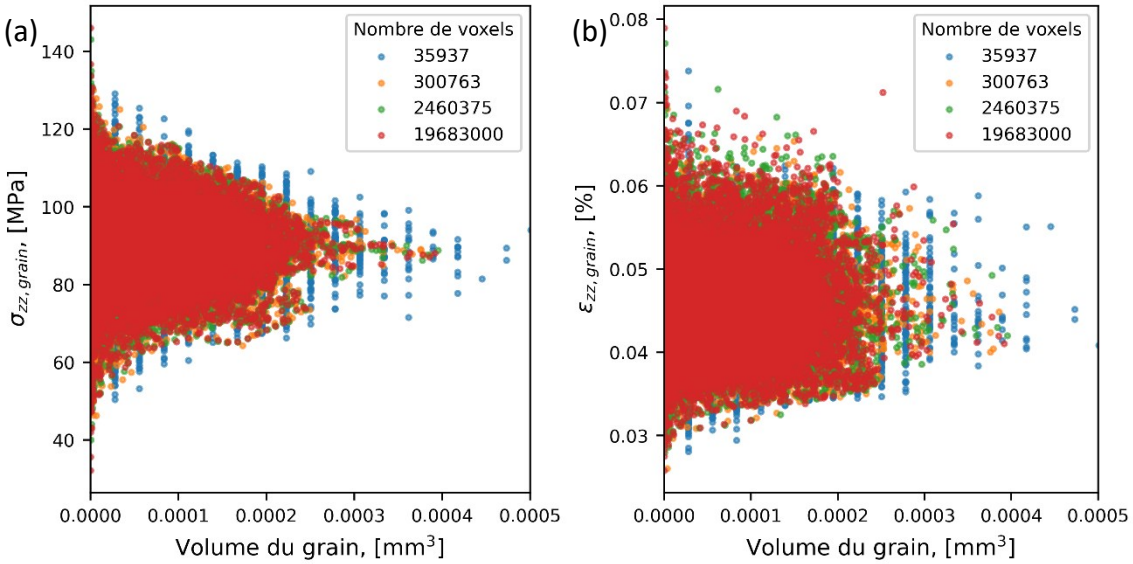


Figure 78. (a) $\sigma_{zz,grain}$ et (b) $\varepsilon_{zz,grain}$ en fonction du volume pour différents nombres de voxels dans le VER de l'agrégat polycristallin

Cependant, l'intérêt de cette étude ne réside pas uniquement dans la valeur moyenne de la dissipation, mais également dans la capacité du maillage à représenter de manière fidèle les champs locaux de dissipation, en particulier leur hétérogénéité. Pour cette raison, un compromis a été retenu, avec un maillage comportant $135 \times 135 \times 135$ voxels, offrant un bon équilibre entre précision locale et coût numérique.

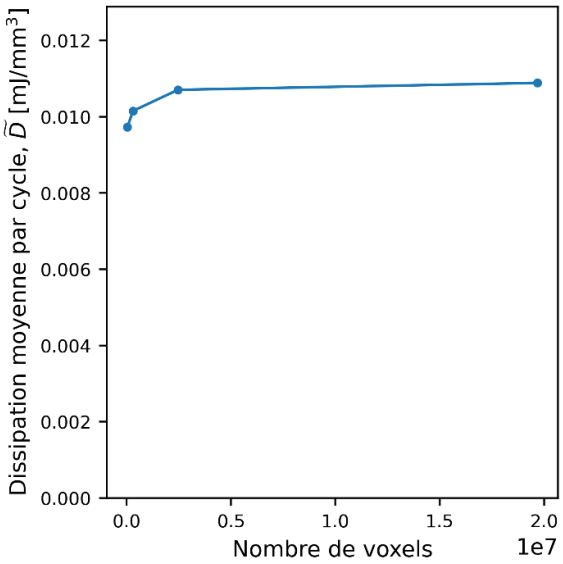


Figure 79. Évolution de la dissipation moyenne par cycle en fonction du nombre de voxels.

4.3. Évolution de la dissipation intrinsèque moyenne par cycle

4.3.1. Influence du nombre de tirage d'orientations sur l'activation du glissement plastique

Comme déjà montré au chapitre 3, le nombre de tirages d'orientations joue un rôle déterminant dans l'analyse statistique de la microplasticité.

Pour les 30 volumes élémentaires représentatifs étudiés, le nombre total de zones plastifiées a été comptabilisé pour chaque amplitude de chargement. Plutôt que d'effectuer une simple moyenne, l'ensemble des voxels issus des 30 tirages a été considéré comme appartenant à une même population statistique. Ainsi, ces tirages ne sont pas traités comme 30 VERs indépendants, mais comme un ensemble unifié décrivant la réponse globale du matériau.

La Figure 80(a) montre que l'évolution du nombre de grains plastifiés présente une certaine courbure. Lorsque la pente moyenne est calculée pour des amplitudes comprises entre 68 MPa et 82 MPa (correspondant à environ 10 % de grains plastifiés), une valeur moyenne de 41 est obtenue. La Figure 80(b) illustre que la pente locale décroit de 65 à 5 pour les amplitudes comprises entre 70 MPa et 90 MPa.

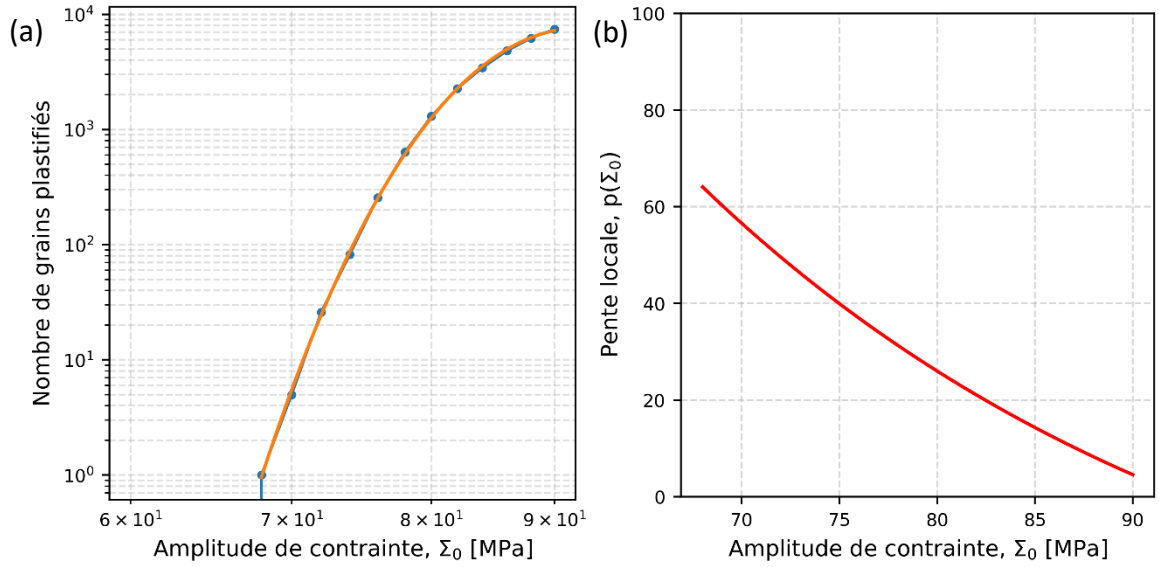


Figure 80. (a) Évolution du nombre de grains plastifiés en échelle logarithmique avec un ajustement par spline. (b) évolution de la pente locale pour 30 tirages d'orientation et de tessellation donnée.

Concernant la méthode basée sur les lamelles plastifiées, lorsque l'analyse de la pente moyenne est faite sur le nombre de lamelles plastifiées pour des amplitudes comprises entre 64 MPa et 90 MPa, une valeur moyenne de 30 est obtenue. La Figure 81(b) indique qu'aux faibles amplitudes (inférieures à 75 MPa), la pente locale présente de légères oscillations, puis diminue très légèrement au-delà de 75 MPa. Ainsi l'évolution basée sur l'analyse au niveau des lamelles peut être modélisée par une loi puissance (Figure 82).

Cette distinction est essentielle, car elle corrobore les hypothèses du modèle probabiliste à deux échelles, selon lesquelles le nombre de sites actifs suit une loi puissance. Elle permet également de donner une interprétation physique cohérente à la notion de sites introduite dans le P.P.P., reliant ainsi les observations issues de la plasticité cristalline au cadre théorique du modèle probabiliste.

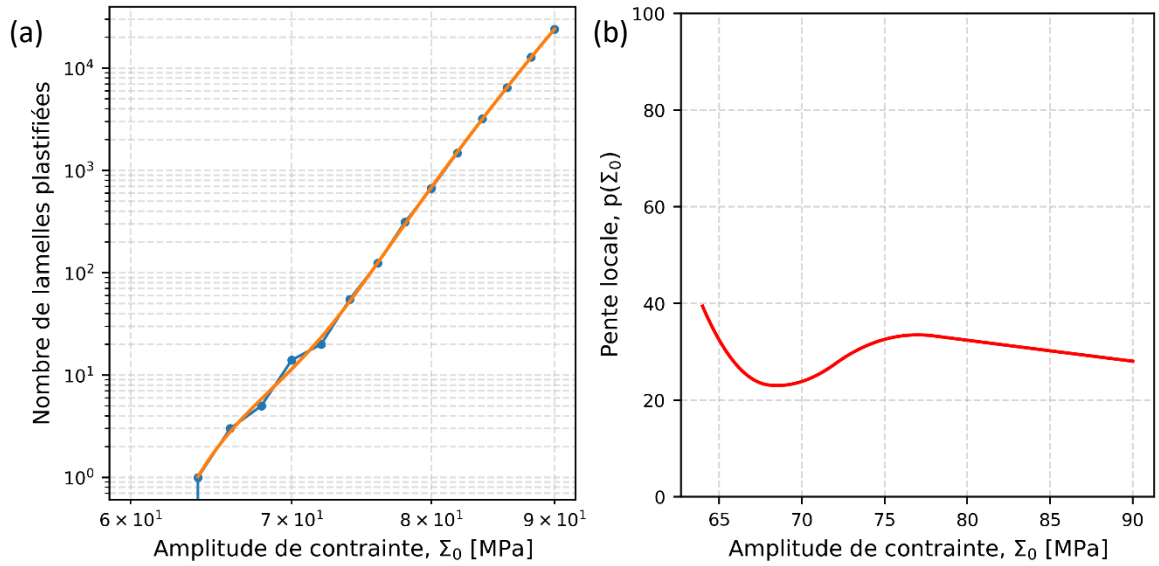


Figure 81. (a) Évolution du nombre de lamelles plastifiées en échelle logarithmique avec un ajustement par spline. (b) Évolution de la pente locale pour 30 tirages d'orientation et de tessellation.

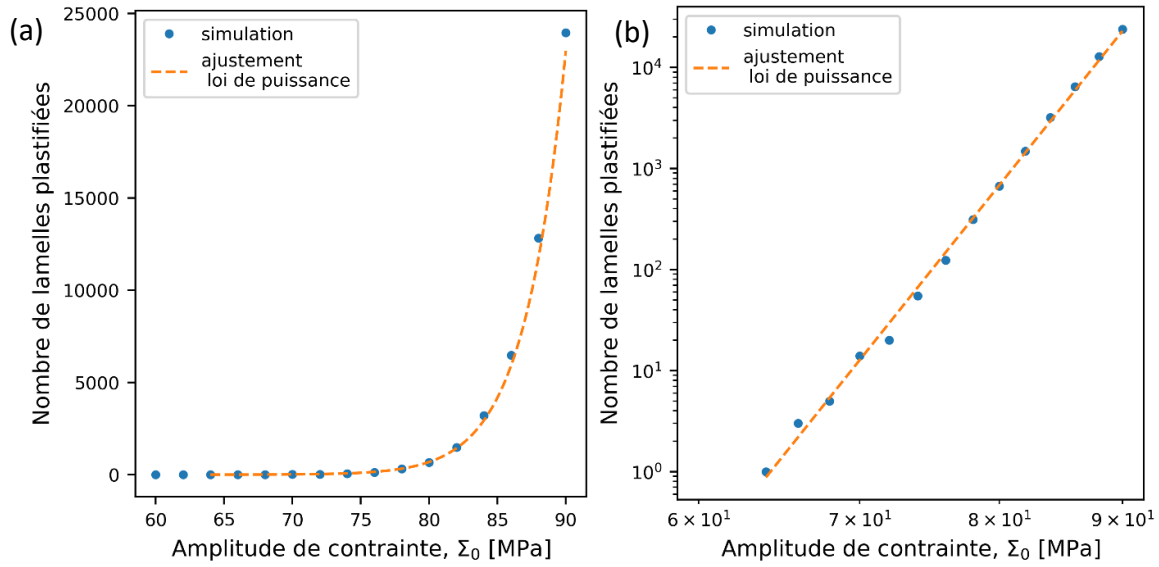


Figure 82. (a) Évolution du nombre de lamelles plastifiées dans l'échelle linéaire (a) et logarithmique (b) pour un seuil de 7×10^{-4}. La ligne pointillée orange représente l'ajustement de la loi de puissance réalisé pour 64 MPa et 90 MPa

4.3.2. Analyse de la dissipation moyenne par cycle

L'évolution de la dissipation moyenne par cycle est étudiée pour des amplitudes de chargement comprises entre 60 et 90 MPa. Comme montré à la Figure 83, plus l'amplitude

augmente, plus la dissipation croît, en accord avec les observations déjà présentées au chapitre 3.

En représentation logarithmique Figure 83(b), cette évolution est quasi linéaire avec une pente moyenne de 30 lorsque l'ajustement linéaire est réalisé entre 60 MPa à 70 MPa. Cette valeur se compare favorablement aux résultats expérimentaux obtenus par (Munier et al., 2014), où la pente se situe entre 10 et 30. Lorsque la pente locale est analysée (Figure 83(c)), un comportement décroissant est obtenu en fonction de l'amplitude de contrainte avec des valeurs comprises entre 40 et 20 pour des amplitudes comprises entre 60 et 90 MPa.

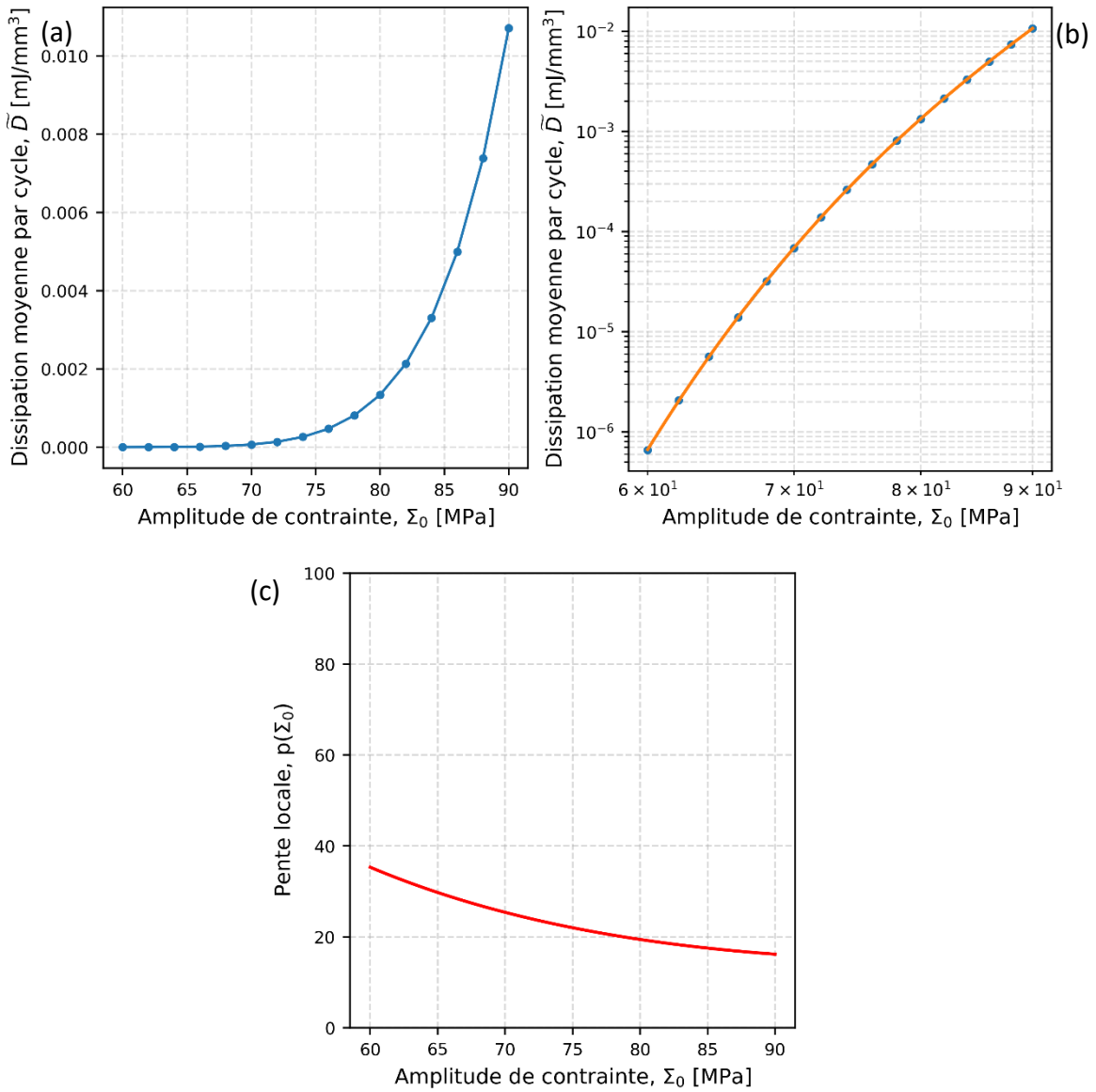


Figure 83.(a) Évolution de la dissipation moyenne par cycle pour un VER de 625 grains. La dissipation D est calculée pour chaque voxel à la fin du 1er cycle. (b) Dissipation moyenne par cycle dans l'échelle logarithmique. La ligne pointillé en orange représente l'ajustement linéaire entre 60 MPa et 70 MPa. (c) Évolution de la pente locale pour un tirage d'orientation et de tessellation donné.

Dans la Figure 84, afin de discuter les résultats relatifs à l'évolution de la dissipation moyenne par cycle au regard du modèle probabiliste à deux échelles, l'évolution des pentes

locales obtenues précédemment pour l'activation du glissement plastique, augmentées de deux unités, est présentée, conformément à la démarche décrite au chapitre 3. La Figure 84(a) et la Figure 84(b) présentent un comportement globalement similaire ; toutefois, une différence plus marquée apparaît au début de la microplasticité, la pente locale étant amorcée plus précocement dans le cas des 30 VERs (Figure 84(b)).

Par ailleurs, les trois courbes de la Figure 84 montrent globalement un comportement décroissant avec l'augmentation de l'amplitude de contrainte. En revanche, les résultats mettent en évidence un décalage systématique vers le haut des pentes obtenues à partir de l'activation des systèmes de glissement par rapport à celles issues de la dissipation.

Le lien entre l'évolution de l'auto-échauffement et celle de l'activation plastique, tel que proposé par le modèle probabiliste à deux échelles, n'est pas retrouvé lorsque l'analyse de l'activation des systèmes de glissement est réalisée à l'échelle du grain, en accord avec les observations du chapitre 3. Toutefois, il apparaît qu'à faibles amplitudes de chargement, un lien possible semble émerger. Cela suggère que l'échelle des sites du P.P.P. ne correspond pas à celle du grain et pourrait plutôt être associée à une échelle intermédiaire, telle que celle des lamelles.

La Figure 85, illustre par ailleurs que, pour des amplitudes plus élevées, des hétérogénéités marquées apparaissent dans le champ de dissipation, identifiées par les zones en jaune et en rouge. L'utilisation de la modélisation par lamelles**,** associée à des bandes de glissement caractérisées par une contrainte de cisaillement critique variable, conduit à une localisation plus nette du glissement plastique en bandes, ainsi qu'à une accumulation plus marquée de la dissipation ΔD.

De plus, la Figure 86 montre l'évolution de la dissipation pour 30 tirages d'orientations et de tessellations. Comme pour le chapitre 3, il est possible de voir une très faible variabilité de la dissipation entre chaque tirage d'orientations.

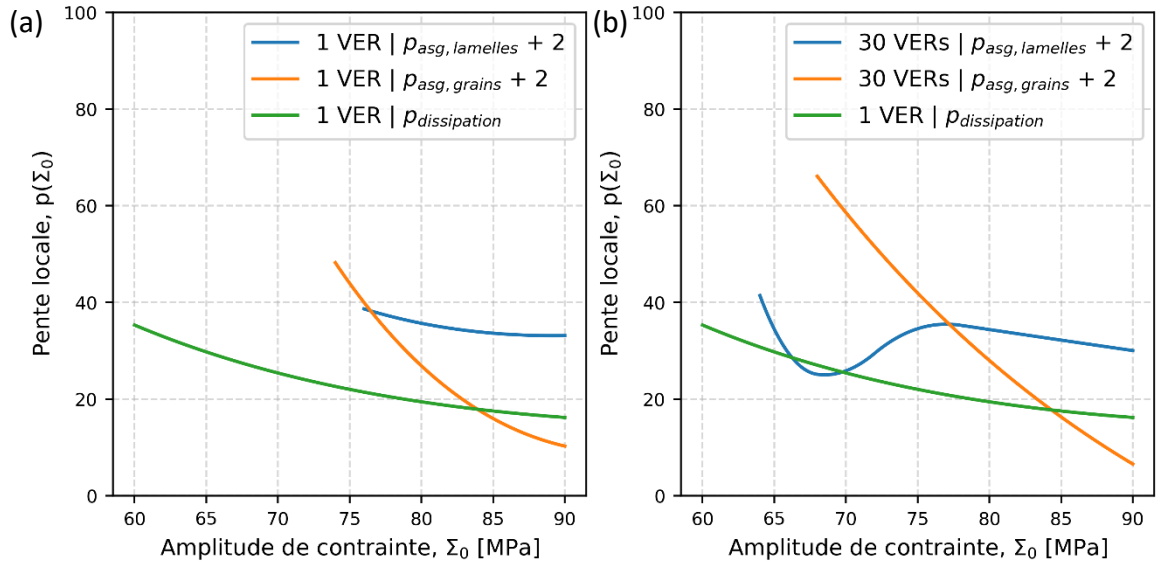


Figure 84. Comparaison des pentes locales p associées au nombre de grains activés, au nombre de lamelles plastifiées et à l'évolution de la dissipation, où asg est un acronyme qui correspond à l'activation des systèmes de glissement. (a) 1 VER et (b) 30 VERs.

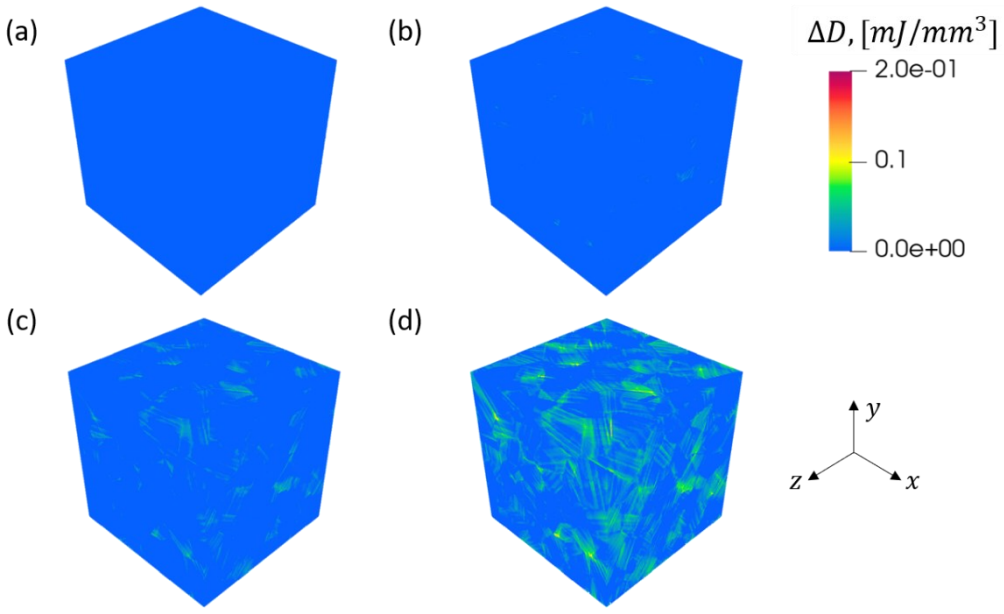


Figure 85. Dissipation cumulée par voxel pour différentes amplitudes de contrainte (a) 60 MPa, (b) 70 MPa, (c) 80 MPa et (d)90 MPa

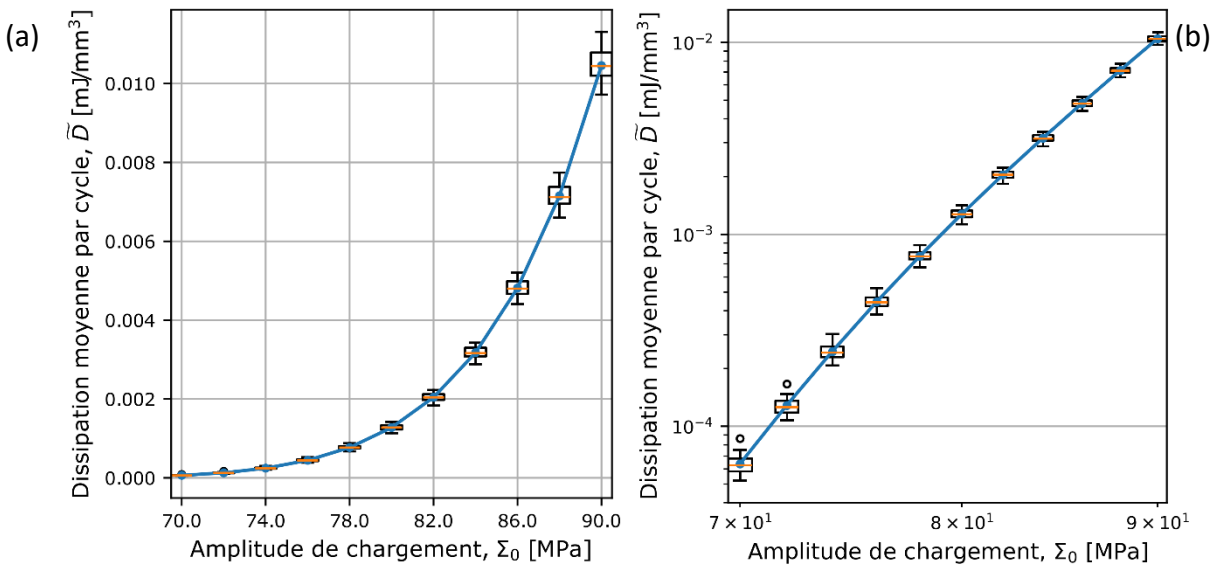


Figure 86. Évolution de la dissipation moyenne par cycle en fonction de l'amplitude de chargement pour 625 grains et 30 tirages d`orientations. (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique. Pour chaque box-plot, le point en bleu représente la moyenne et la ligne orange la médiane.

4.3.3. Conclusion intermédiaire

Dans cette section, une comparaison des champs de dissipation obtenus par les deux approches (celle du chapitre 3 et celle du présent chapitre) est réalisée. Il est notable qu'avec la modélisation avec une contrainte de cisaillement critique constante, la dissipation se localise plus fortement dans certaines zones de l'agrégat polycristallin (Figure 87). En revanche, avec la modélisation par lamelles, la dissipation apparaît de manière localisée dans les lamelles mais avec une répartition plus uniforme dans l'agrégat, reflétant mieux la formation potentielle de bande de glissement au sein du VER.

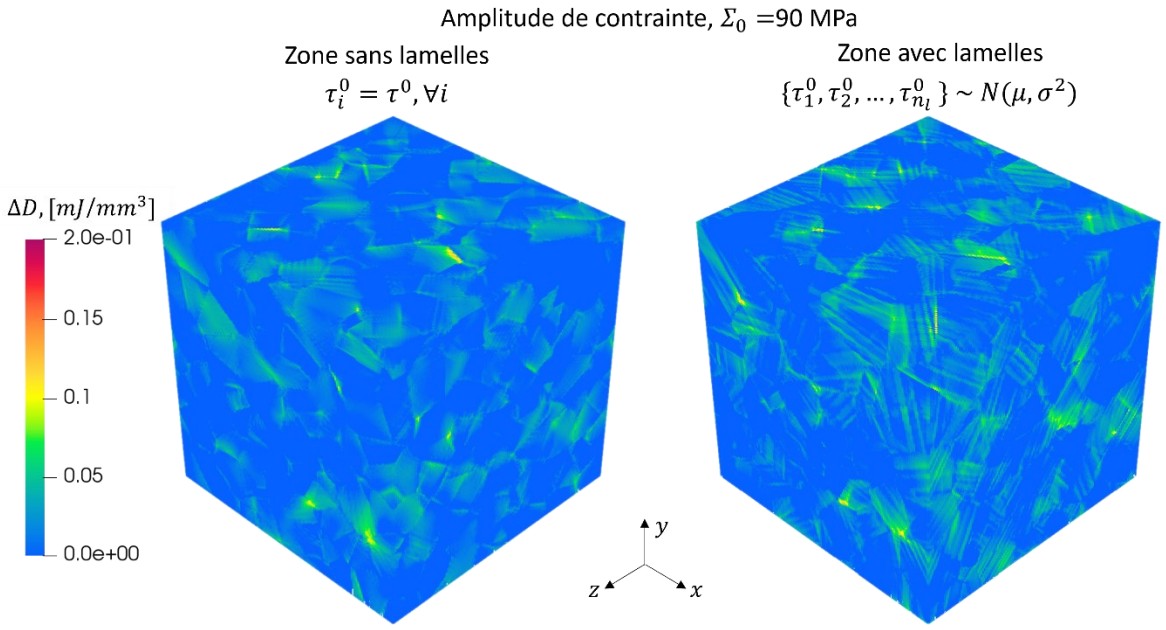


Figure 87. Comparaison du champ de dissipation, ΔD par deux méthodes (a) zone sans lamelles et (b) zone avec lamelles avec un nombre de voxels de 135 x 135x 135

Lorsque la dissipation moyenne par cycle issue des deux méthodes est comparée, de faibles différences apparaissent au niveau de l'évolution quantitative. En particulier, pour des amplitudes de chargement faibles, par exemple entre 60 et 70 MPa, la pente de la courbe logarithmique est égale à 32 pour la modélisation par voxel avec un τ^0 constant. Pour la modélisation par lamelles, la pente diminue légèrement et atteint 30 pour la même plage d'amplitude (Figure 88). C'est normal car comme τ^0 est variable il y a plus de chance de voir apparaitre de la dissipation à faible amplitude.

Cependant, il est important de remarquer que dans ce dernier cas, le coefficient de variation (CV) utilisé pour décrire la variabilité de la contrainte de cisaillement critique résolue a été fixé à 0,05.

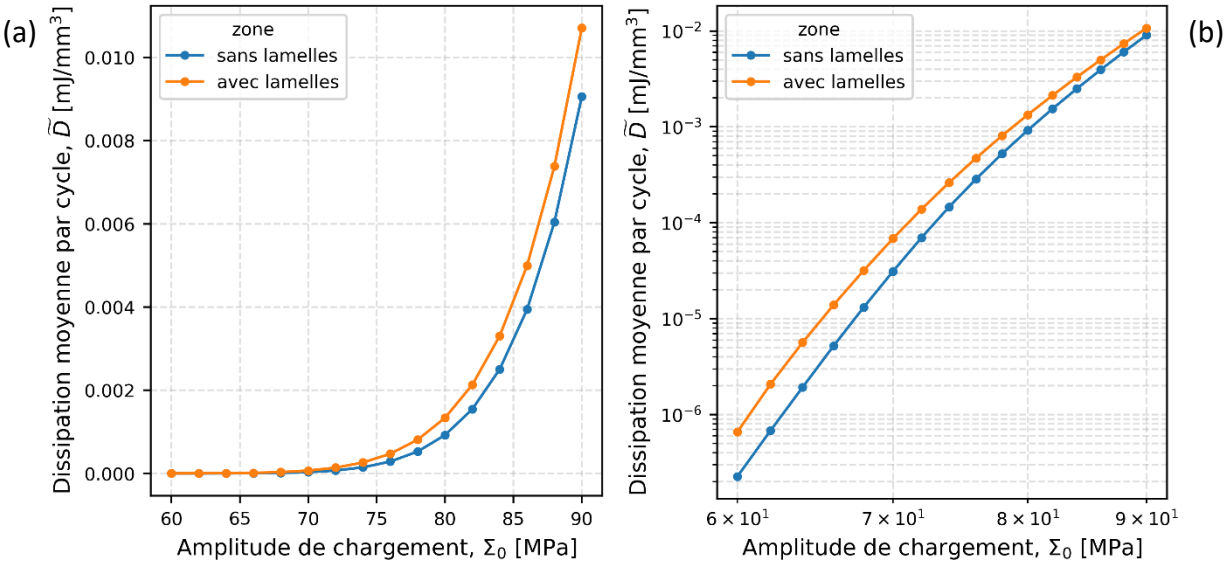


Figure 88. Comparaison de l'évolution de la dissipation intrinsèque moyenne de la zone sans lamelles avec τ^0 constante et zone avec lamelles et τ^0 variable avec une distribution normale (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique.

Finalement, l'étude de l'évolution de la dissipation moyenne par cycle a mis en évidence l'importance d'introduire une variabilité de la contrainte de cisaillement résolue dans une zone intermédiaire organisée en lamelles. Cette variabilité permet de conforter les hypothèses du modèle probabiliste à deux échelles, selon lesquelles le nombre de sites actifs suit une loi de puissance. Elle offre également une interprétation physique cohérente de la notion de sites introduite dans le Processus Ponctuel de Poisson.

Dans la section suivante, une étude des indicateurs de fatigue sera menée pour poursuivre le dialogue entre l'étude numérique d'un agrégat de ce travail et le modèle probabiliste à deux échelles.

4.4. Indicateurs de Fatigue (FIP)

Dans la continuité des travaux présentés au chapitre 3, où un indicateur de fatigue (FIP) a été examiné pour deux types de zones (voxel et grain), l'analyse menée dans cette section

se focalise sur l'utilisation de cet indicateur de fatigue pour les lamelles et les grains, désormais constitué par plusieurs lamelles.

La méthodologie adoptée reste la même que celle proposée dans le chapitre 3, une approche en plusieurs étapes. Dans un premier temps, un ensemble de microstructures est généré à l'aide du logiciel Neper, en variant à la fois les orientations cristallographiques et les tessellations. Par la suite, une contrainte imposée est appliquée à chaque VER pour différentes amplitudes de chargement. Le glissement plastique cumulé est ensuite évalué sur un cycle, à la fois par grain et par lamelle. Enfin, l'évolution de ce paramètre permet de définir un seuil arbitraire correspondant à l'initiation du glissement plastique. L'analyse statistique de ce seuil conduit alors à établir la distribution des amplitudes nécessaires à son déclenchement, ainsi qu'à identifier la loi gouvernant son évolution.

4.4.1. Évolution du glissement plastique par grain

Dans cette partie, l'évolution du glissement plastique cumulé dans un cycle est étudié pour une zone par grain à partir de l'équation (9) du chapitre 3. La différence adoptée dans ce chapitre vient de la zone d'analyse. Comme discuté dans la section 4.2, il est nécessaire de définir un sous-ensemble du volume représentatif, VER^* est la région d'analyse sans considérer les grains situés sur les bords.

La Figure 89 montre l'évolution du glissement plastique cumulé maximal (1 VER) pour la zone par grain pour les 10 grains les plus plastifiés. L'augmentation de l'amplitude de chargement conduit à des niveaux plus élevés de glissement plastique, tandis que le grain le plus plastifié varie d'une amplitude à l'autre, notamment en raison des effets de voisinage. Par ailleurs, l'analyse menée sur 30 VERs (Figure 90) met en évidence une dispersion plus importante des valeurs de glissement sur la Figure 90(a) que sur la Figure 90(b), confirmant des tendances similaires à celles précédemment observées au chapitre 3.

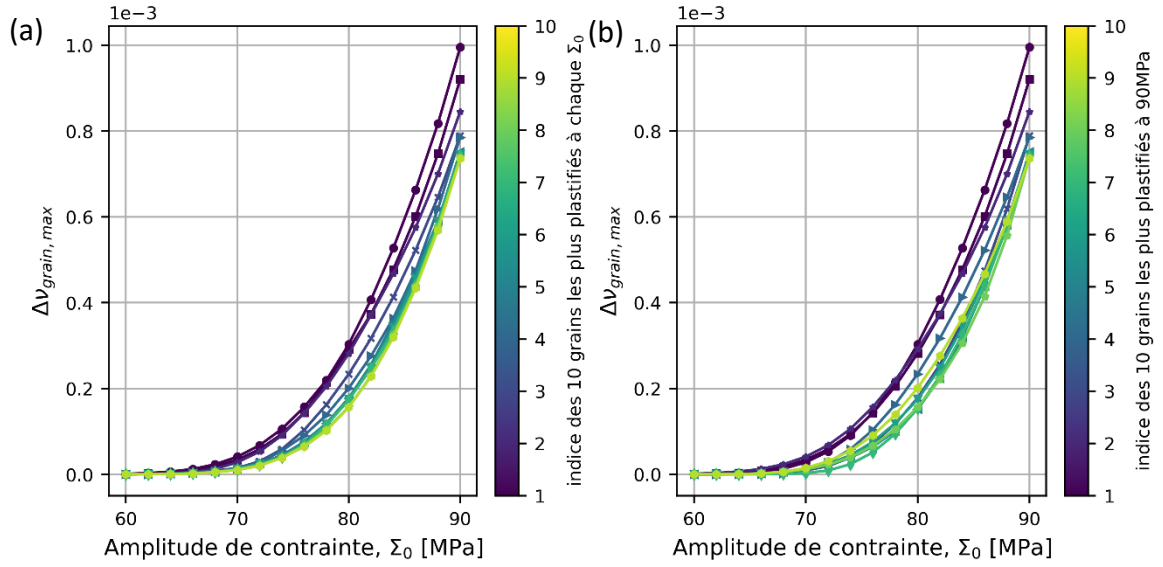


Figure 89. (a) Évolution du glissement cumulé maximal, $\Delta\nu_{grain,max}$ (a) à chaque amplitude Σ_0 (b) à 90MPa. Sur la barre des couleurs, les 10 premiers indices des grains les plus plastifiés sont affichés. Modélisation avec lamelles.

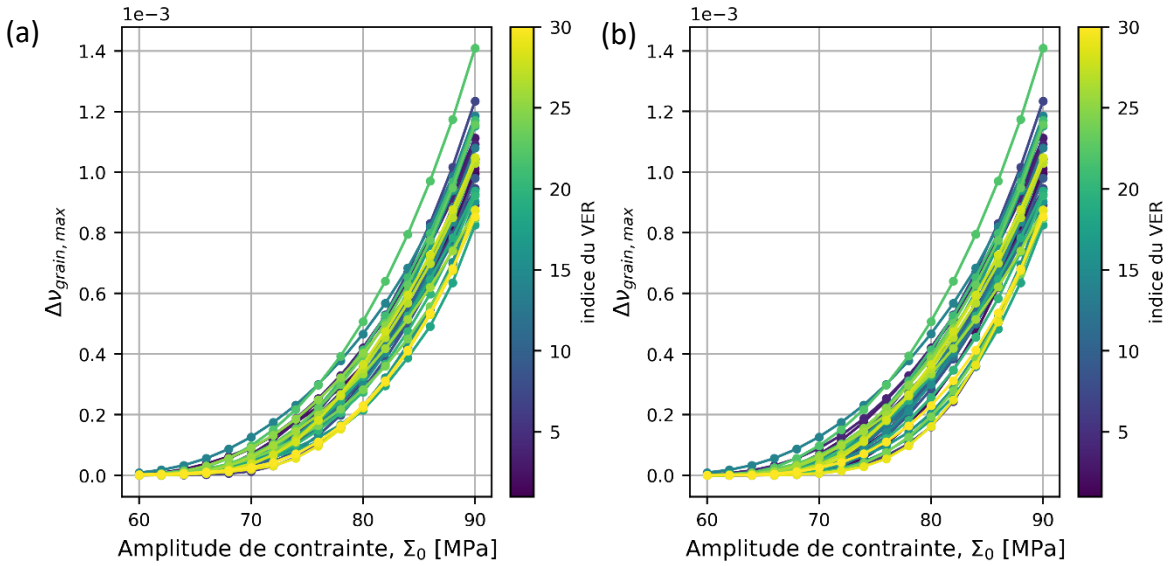


Figure 90. Évolution du glissement cumulé maximal, $\Delta\nu_{grain,max}$ pour chaque VER (a)grain le plus plastifié à chaque Σ_0 (b)grain le plus plastifié à 90 MPa. Sur la barre de couleurs, les indices des 30 VERs sont affichés. Modélisation avec lamelles.

4.4.2. Évolution du glissement plastique par lamelle

Pour étudier l'évolution du glissement plastique par lamelle, il faut utiliser un sous-ensemble du VER. Le sous-ensemble VER^{**} a été définie dans la section 4.2 pour travailler avec les lamelles qui ne sont pas sur les bords.

Il peut être noté sur la Figure 91 que l'évolution du glissement plastique des lamelles les plus plastifiées à 90 MPa possède une dispersion plus importante que celle des lamelles les plus chargées pour chaque amplitude. En outre, il est possible d'étudier dans la Figure 91(b), les différentes vitesses d'évolution pour différentes lamelles les plus chargées. Parfois la lamelle la plus chargée à 90MPa peut posséder des valeurs de glissement inferieures aux

autres lamelles les plus plastifiées. Une explication possible est l'influence du voisinage et de l'incompatibilité des champs de contraintes. Si par exemple, les lamelles étaient libres dans l'espace, ce comportement ne serait pas attendu.

Dans la Figure 92, l'évolution du glissement plastique de la lamelle la plus plastifiée est étudiée pour 30 tirages d'orientations. Il peut être remarqué que la dispersion du glissement plastique est plus élevée si les lamelles les plus plastifiées à 90MPa sont analysées.

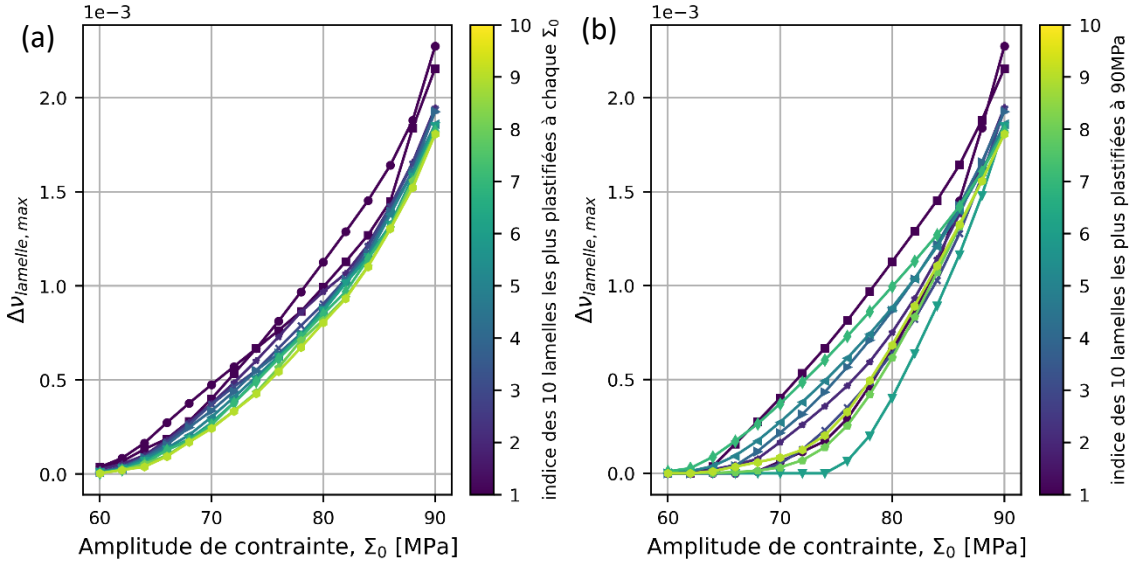


Figure 91. (a) Évolution du glissement cumulé maximal, $\Delta\nu_{lamelle,max}$ (a) à chaque amplitude Σ_0 (b) à 90MPa. Sur la barre des couleurs, les 10 premiers indices des lamelles les plus plastifiées sont affichés. Modélisation avec lamelles.

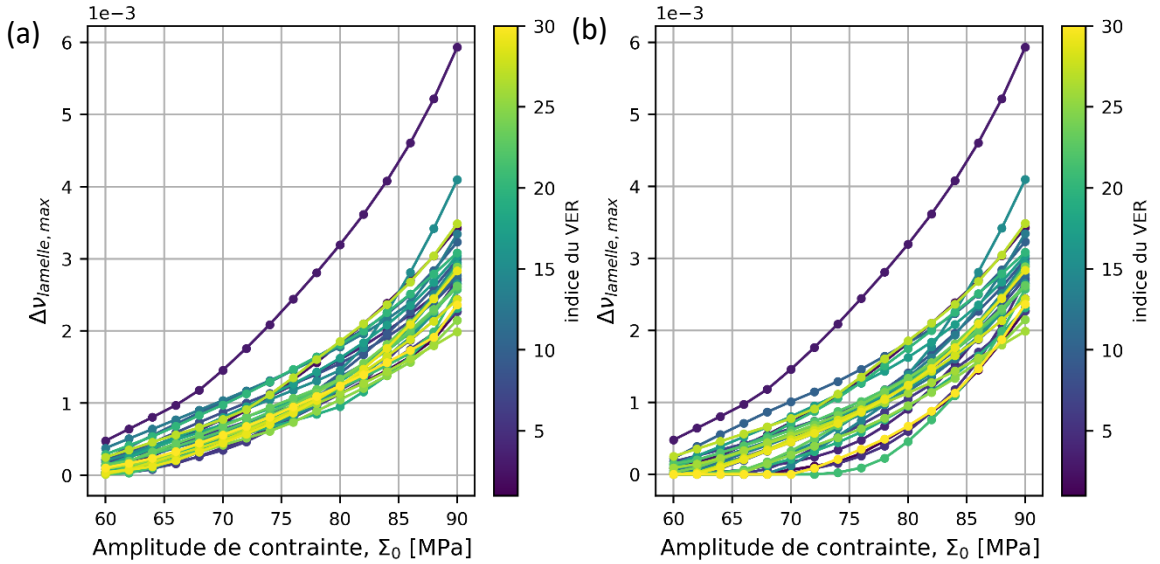


Figure 92. Évolution du glissement cumulé maximal, $\Delta\nu_{lamelle,max}$ pour chaque VER (a)lamelle la plus plastifiée à chaque Σ_0 (b)lamelle la plus plastifiée à 90 MPa. Sur la barre de couleurs, les indices des 30 VERs sont affichés. Modélisation avec lamelles.

4.4.3. Distribution statistique du FIP

Pour l'étude statistique du FIP, la méthodologie adoptée suit la même démarche que celle décrite au chapitre 3 (Figure 64, chapitre 3). À partir des évolutions du glissement

plastique cumulé maximal obtenues pour 30 tirages d'orientations, aussi bien dans l'approche par grain que dans l'approche par lamelle, un seuil arbitraire a été défini. L'amplitude nécessaire pour atteindre ce seuil a ensuite été déterminée pour chaque tirage, permettant ainsi de tracer les histogrammes des amplitudes correspondantes et de modéliser ces distributions à l'aide d'une de loi de Weibull.

Dans le cas de l'approche par grain, la Figure 93 présente les histogrammes d'amplitudes pour les valeurs de seuil comprises entre 1×10^{-5} et 2×10^{-4}. L'ajustement par la loi de Weibull conduit à des valeurs du paramètre de forme m qui peuvent varier de 39 à 49. Pour l'approche par lamelle, la Figure 94 montre que, pour des seuils compris entre 5×10^{-4} et 1×10^{-3}, la valeur de m reste comprise entre 28 et 30. Il est intéressant de noter que pour l'étude à l'échelle des lamelles, la valeur de m, liée à la dispersion statistique, demeure pratiquement stable pour l'ensemble des seuils considérés.

Ce résultat est particulièrement significatif, car l'approche par lamelle conduit à une dispersion des valeurs de fatigue (m) cohérente avec celles obtenues par la méthode d'auto-échauffement, notamment pour des amplitudes faibles (entre 60 MPa et 70 MPa). Ces observations renforcent le lien avec le modèle probabiliste à deux échelles et confirment que la zone par lamelle constitue un bon candidat pour représenter les sites dans le cadre du P.P.P. associé au modèle probabiliste à deux échelles.

Dans la section suivante, une analyse complémentaire du nombre de tirages sera présentée afin d'évaluer la sensibilité de cette dispersion vis-à-vis du nombre d'orientations considérées.

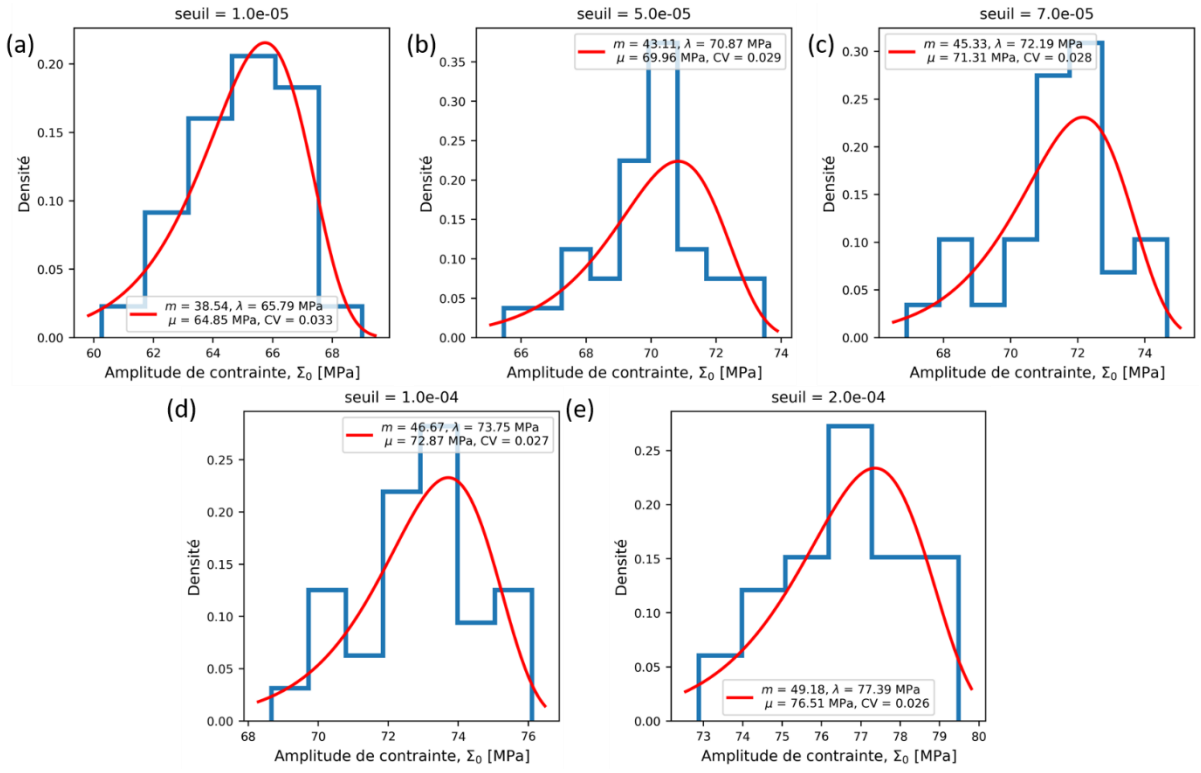


Figure 93. Distribution de l'amplitude nécessaire à l'activation plastique, selon l'approche par grain pour des seuils compris entre 1×10^{-5} à 2×10^{-4}.Les paramètres m et λ correspondent aux paramètres de la loi d'ajustement de Weibull. μ représente la moyenne et CV, le coefficient de variation.

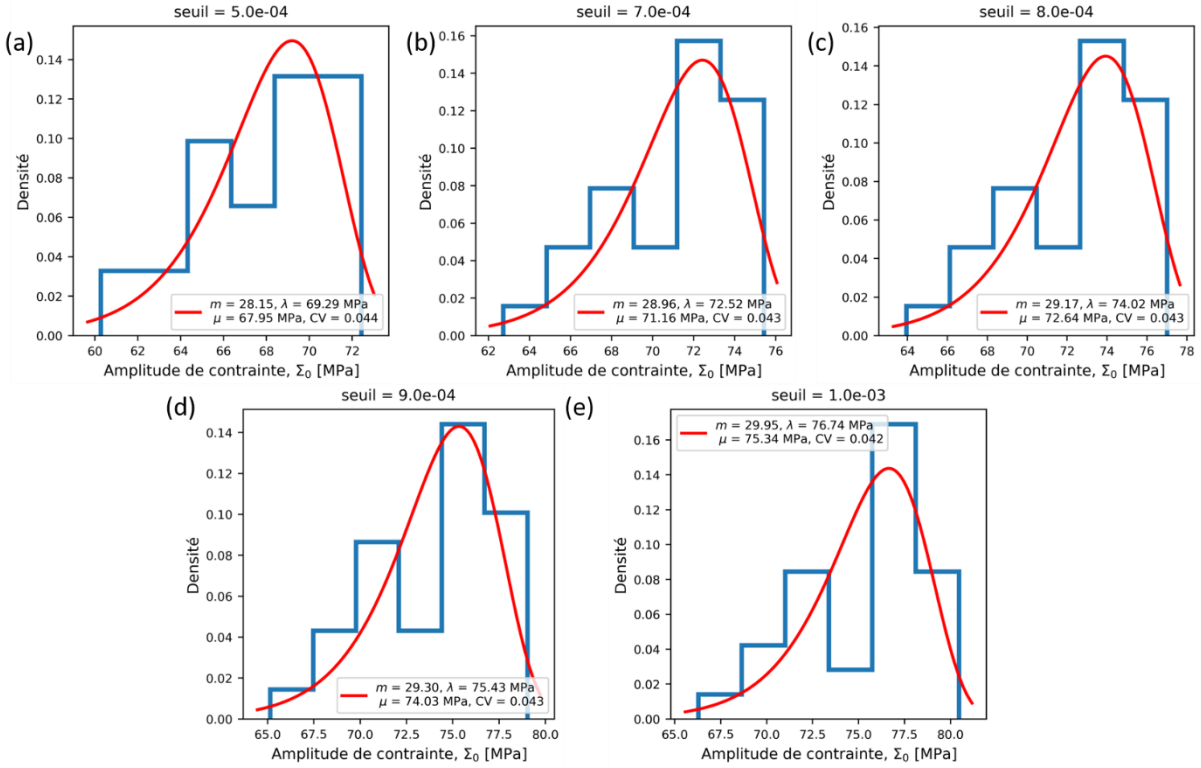


Figure 94. Distribution de l'amplitude nécessaire à l'activation plastique, selon l'approche par lamelle pour des seuils compris entre 5×10^{-4} à 1×10^{-3}.Les paramètres m et λ correspondent aux paramètres de la loi d'ajustement de Weibull. μ représente la moyenne et CV, le coefficient de variation.

4.4.4. Influence du nombre de tirages sur la dispersion des histogrammes de fatigue d'un polycristal

Le nombre de tirages d'orientation constitue un paramètre clé dans l'analyse statistique du FIP, car il influence directement la dispersion observée dans les histogrammes de fatigue. La Figure 95 montre l'évolution des coefficients de la loi de Weibull pour un nombre de tirages compris entre 10 et 44. À partir d'environ 30 tirages, les coefficients de la loi de Weibull deviennent presque constants. Ce résultat montre que 30 tirages suffisent pour obtenir une représentativité statistique satisfaisante du comportement global. Dans cette étude, le nombre de tirages a été fixé à 30, afin d'assurer un bon équilibre entre la précision statistique et le coût de calcul.

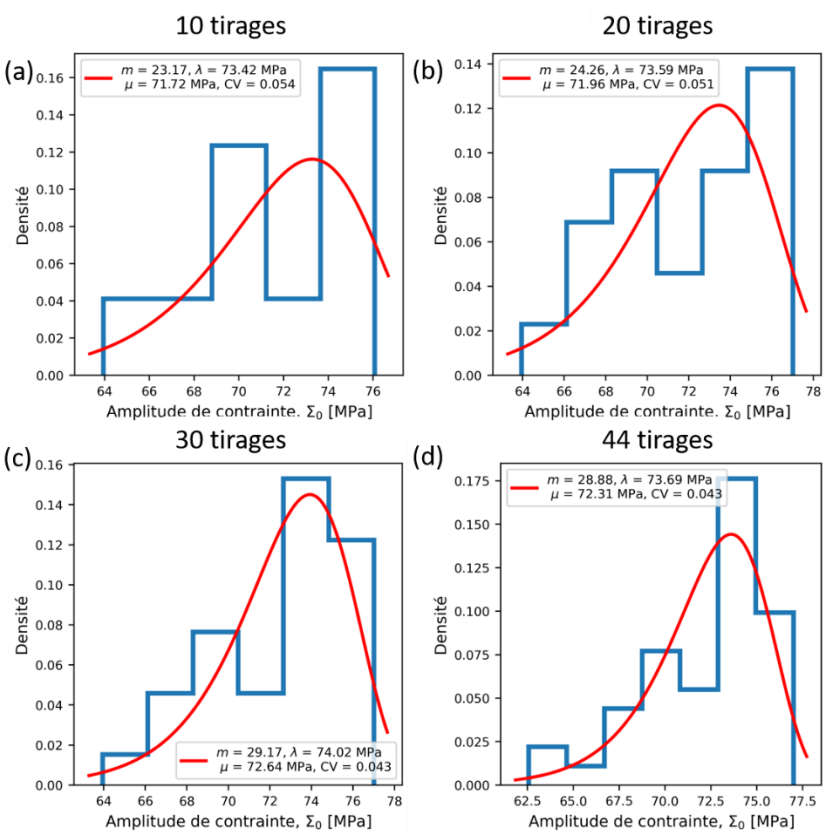


Figure 95. Distribution de l'amplitude nécessaire à l'activation plastique, selon l'approche par lamelle pour de seuil égal à 8×10^{-4}.(a) 10 tirages (b) 20 tirages (c) 30 tirages et (d) 44 tirages. Les paramètres m et λ correspondent aux paramètres de la loi d'ajustement de Weibull. μ représente la moyenne et CV, le coefficient de variation.

4.5. Conclusions

L'étude menée dans ce chapitre a permis d'analyser en détail l'impact de l'introduction d'une échelle intermédiaire, celle des lamelles, sur la description des phénomènes dissipatifs et des mécanismes de glissement plastique. Les principaux enseignements peuvent être résumés comme suit :

- La modification de la nature de l'élément de base pour l'étude des phénomènes dissipatifs avec une zone intermédiaire entre les voxels et les grains, à savoir celle des lamelles a fourni une modélisation plus réaliste de la localisation par bandes du glissement plastique.
- L'introduction des lamelles permet de localiser la dissipation intrinsèque sous forme de bandes, en cohérence avec les mécanismes physiques observés. De plus, le coefficient de variation (CV) de la contrainte de cisaillement critique a été choisi suffisamment faible pour ne pas impacter la physique du modèle de plasticité cristalline (une dispersion trop élevée conduit à un comportement dominé par la distribution statistique).

- La dissipation intrinsèque moyenne par cycle est faiblement dépendante de l'épaisseur des lamelles, ce qui était attendu compte tenu des éléments considérés dans la loi de comportement.
- Comme déjà constaté au chapitre 2, la dissipation moyenne par cycle reste également faiblement sensible au raffinement du maillage.
- Les indicateurs de fatigue basés sur le glissement plastique ont été analysés à deux échelles : celle du grain et celle de la lamelle. Cette double approche permet d'évaluer la pertinence de chaque niveau de description pour relier les mécanismes microscopiques aux signatures énergétiques macroscopiques.

- La Figure 96(a) présente une comparaison entre trois pentes possibles en fonction de la zone par grain. L'analyse moyennée à l'échelle du grain ne conduit pas à des résultats cohérents avec le modèle probabiliste à deux échelles (P.P.P). Bien qu'un dialogue entre la fatigue et le P.P.P soit observé pour un certain seuil, caractérisé par le croisement des courbes bleue et rouge, les valeurs de pente obtenues ne sont pas compatibles avec les mesures expérimentales d'auto-échauffement ni avec la pente observée dans un diagramme log-log de la dissipation cyclique.

- La Figure 96(b) présente une comparaison analogue à l'échelle de la lamelle. Contrairement à l'analyse par grain, à faibles amplitudes de contrainte, l'approche moyennée par lamelle fournit des résultats cohérents avec le modèle probabiliste à deux échelles. La pente observée dans un diagramme log-log de la dissipation cyclique en fonction de l'amplitude des contraintes peut être reliée à celle du scénario d'activation de la microplasticité, en assimilant les sites activés aux lamelles dépassant un seuil d'activité plastique.

L'approche intermédiaire par lamelle apparaît ainsi particulièrement pertinente. Elle permet d'établir un lien entre la dispersion en fatigue et les courbes d'auto-échauffement similaire à celui décrit par le modèle probabiliste à deux échelles. Contrairement aux résultats présentés au chapitre 3, les valeurs de l'exposant m ainsi estimées sont en accord avec les résultats classiques de la littérature.

Toutefois, le modèle de plasticité cristalline enrichi par les lamelles ne parvient pas à reproduire le régime primaire des courbes d'auto-échauffement. Dans le prochain chapitre une modification de la loi de comportement de plasticité cristalline sera apportée afin de le modéliser.

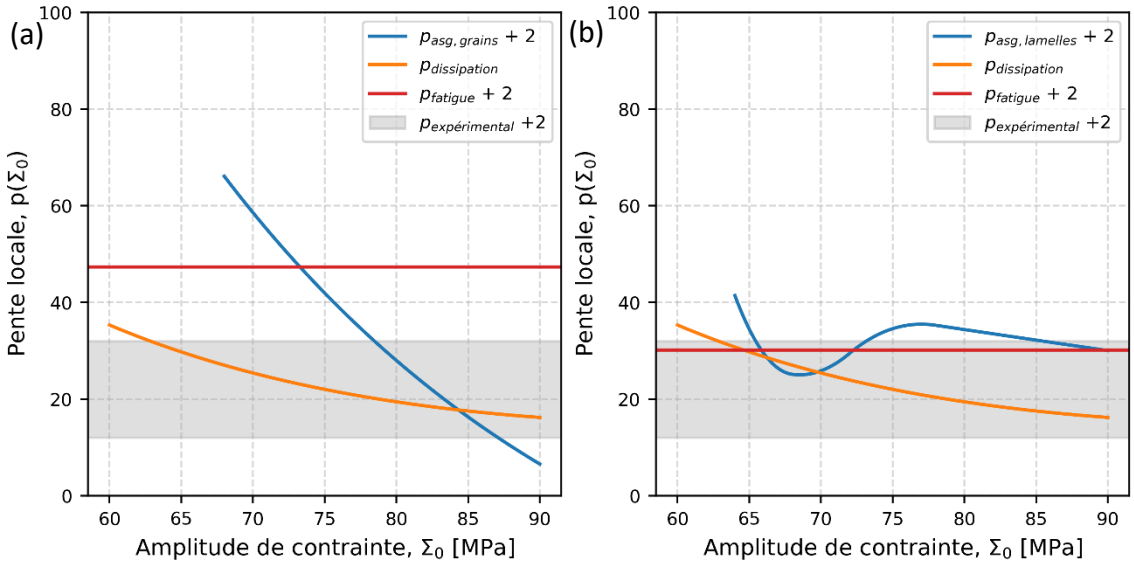


Figure 96. (a) Comparaison entre les pentes locales associées à l'activation des systèmes de glissement à l'échelle du grain ($p_{asg,grains}$), à la dissipation ($p_{dissipation}$) et à la dispersion en fatigue ($p_{fatigue}$), ainsi qu'à la plage de pentes expérimentales($p_{expérimental} \in [10,30]$) (Munier et al., 2014). Le seuil d'activation est fixé à 7×10^{-5}. (b) Comparaison entre les pentes locales associées à l'activation des systèmes de glissement à l'échelle de la lamelle ($p_{asg,lamelles}$), à la dissipation ($p_{dissipation}$) et à la dispersion en fatigue ($p_{fatigue}$), ainsi qu'à la plage de pentes expérimentales ($p_{expérimental} \in [10,30]$) (Munier et al., 2014). Le seuil d'activation est fixé à 7×10^{-4}.

Chapitre 5 : Modélisation du régime primaire d'auto-échauffement

Sommaire

Introduction 142
5.1. Loi de comportement en plasticité cristalline : régime primaire et secondaire . 143
5.1.1. Présentation de la loi de comportement considérée 143
5.1.2. Schéma d'intégration semi-implicite de la loi 145
5.1.3. Étude de la loi 1D 150
5.2. Agrégat polycristallin soumis à un chargement uniaxial de traction-compression 151
5.2.1. Comportement mésoscopique : évolution de la contrainte nominale 151
5.2.2. Évolution de la dissipation intrinsèque moyenne par cycle 152
5.3. Influence des paramètres de la loi de comportement 155
5.3.1. Influence de m_2 155
5.3.2. Influence de T^0 et C_2/D_2 158
5.3.3. Influence de C_2 et D_2 161
5.4. Influence d'un état initial non-vierge 165
5.4.1. Évolution de la contrainte nominale 165
5.4.2. Évolution de la dissipation moyenne par cycle 166
5.4.3. Influence du temps de pause sur la dissipation moyenne par cycle 167
5.5. Influence d'une pré-déformation plastique 169
5.6. Conclusion 171

Introduction

Dans les chapitres précédents, la modélisation du régime secondaire des courbes d'auto-échauffement a été réalisée. Plus spécifiquement, au chapitre 4, l'introduction dans les grains de lamelles, possédant une contrainte de cisaillement résolue critique variable, a permis d'améliorer le dialogue entre les courbes d'auto-échauffement et la dispersion en fatigue et ainsi valider le cadre du modèle probabiliste à deux échelles. La dernière brique qu'il reste à introduire concerne donc la modélisation du régime primaire, ce qui constitue l'objet d'étude de ce chapitre.

Le régime primaire est caractérisé par de la microplasticité diffuse dans les grains, associée à la désorientation locale des dislocations (Figure 10 et Figure 11 du chapitre 1). Il présente généralement une pente proche de 2 pour la plupart des alliages métalliques, lorsque les courbes d'auto-échauffement sont analysées en échelle logarithmique.

Par ailleurs, plusieurs travaux consacrés à l'auto-échauffement se sont intéressés à l'analyse du régime primaire, au regard de différents facteurs d'influence, notamment l'effet d'une précharge (Louge, 2019; Munier, 2012) ainsi que celui du type de sollicitation, en particulier dans le cas de chargements multiaxiaux (Guellec, 2023).

Dans ce contexte, le chapitre 5 propose des ingrédients permettant de modéliser le régime primaire des courbes d'auto-échauffement. Différents paramètres susceptibles d'influencer ce régime seront analysés, tant d'un point de vue qualitatif que quantitatif. Pour ce faire, une nouvelle loi d'écrouissage cinématique non-linéaire sera ajoutée en complément de la loi cinématique linéaire utilisée dans les chapitres précédents. Cette approche permettra d'avoir de la dissipation à faibles amplitudes et d'obtenir, ainsi, les régimes primaire et secondaire.

Ce chapitre est organisé comme suit :

- Première partie : une nouvelle loi d'écrouissage cinématique non-linéaire est ajoutée en s'inspirant d'une loi d'écrouissage proposée par Ohno-Wang (Ohno & Wang, 1993). Elle permettra d'obtenir de la dissipation à faibles amplitudes. Son schéma d'intégration est aussi présenté ainsi que l'étude de l'influence des paramètres associés.
- Deuxième partie : Le comportement macroscopique de l'agrégat polycristallin à l'issue des simulations avec la nouvelle loi de comportement est présenté. Une étude de la dissipation moyenne par cycle est aussi discutée mettant en évidence la présence des deux régimes : le régime primaire et le régime secondaire. Une analyse de sensibilité des paramètres et de leur influence par rapport aux champs de contraintes et vis à vis de la dissipation moyenne par cycle est aussi menée.

- Troisième partie : l'étude de l'influence d'un état initial non standard est initiée en étudiant l'influence d'une précharge sur la réponse de l'agrégat à une sollicitation cyclique.

5.1. Loi de comportement en plasticité cristalline : régime primaire et secondaire

5.1.1. Présentation de la loi de comportement considérée

Dans le chapitre 2, une loi de plasticité cristalline a été présentée et utilisée pour les simulations d'agrégats polycristallins des chapitres 3 et 4. Elle a permis de retrouver une forme de courbe de dissipation proche des résultats expérimentaux pour les sollicitations cycliques d'amplitudes appartenant au domaine de la fatigue polycyclique. En revanche, à faibles amplitudes, aucune dissipation (ou une dissipation négligeable) a été obtenue. Ainsi dans ce chapitre, un écrouissage cinématique non linéaire complémentaire sera ajouté à la loi de plasticité cristalline utilisée dans les chapitres précédents afin de modéliser le régime primaire des courbes d'auto-échauffement.

Un modèle d'écrouissage cinématique basé sur la formulation proposée par Ohno-Wang (OW) (Ohno & Wang, 1993) sera utilisé. C'est une version modifiée du modèle d'Armstrong Frederick (AF) (Armstrong et al., 1966), introduite initialement pour la modélisation de l'évolution de la contrainte moyenne et de l'effet rochet sous chargements cycliques multiaxiaux. McDowell (McDowell, 1995) l'a notamment utilisé pour modéliser l'effet rochet lors de l'étude du contact roue - rail de train.

Plusieurs études ont intégré la loi d'écrouissage cinématique d'Ohno–Wang dans des modèles de plasticité cristalline afin de décrire le comportement cyclique de différents alliages métalliques. Cruzado et al. (Cruzado et al., 2018) ont appliqué ce modèle de plasticité cristalline pour l'alliage base nickel Inconel 718 en vue d'analyser l'influence de la taille de grain sur la durée de vie en fatigue oligocyclique à haute température, en reliant l'écrouissage cinématique aux empilements de dislocations aux joints de grains. Hennessey et al. (Hennessey et al., 2017) ont étudié un alliage d'aluminium 7075-T6 en comparant différentes lois d'écrouissage cinématique au niveau des systèmes de glissement, montrant que la formulation d'Ohno–Wang permet une meilleure prédiction des boucles d'hystérésis cycliques, de l'effet rochet et de la relaxation de la contrainte moyenne sous chargements non symétriques. Dans le même esprit, Schäfer et al. (Schäfer et al., 2019) ont démontré la supériorité de la loi d'Ohno–Wang par rapport aux formulations classiques pour la modélisation du comportement cyclique d'un acier martensitique à haute résistance (SAE 4150), notamment pour la reproduction de l'effet Bauschinger et de la relaxation de la contrainte moyenne. Plus récemment, Li et al. (B. Li et al., 2023) ont intégré une version modifiée de la loi d'Ohno–Wang pour prédire la durée de vie en fatigue à grand et très grand

nombre de cycles d'un alliage d'aluminium 7075-T6, en s'appuyant sur l'énergie de déformation plastique.

Cependant, bien que la loi d'Ohno–Wang soit largement utilisée pour modéliser le comportement cyclique en plasticité cristalline de différents alliages (alliages d'aluminium, aciers à haute résistance, superalliages base nickel), aucun travail n'a, à ce jour, exploité cette loi dans le cadre d'un couplage entre plasticité cristalline et auto-échauffement des matériaux**,** ce qui constitue l'originalité du présent chapitre.

Dans le cadre de sa formulation, l'écrouissage cinématique non linéaire est modélisé comme la somme de différents termes indépendants pour chaque système de glissement s,

$$\dot{x^s} = \sum_{i=1}^{n_{cin}} \dot{x_i^s} \tag{98}$$

où n_{cin} est le nombre d'écrouissages, et où l'évolution du taux du i[ème] écrouissage, $\dot{x_i^s}$, est donnée par

$$\dot{x_i^s} = C_i\dot{\gamma^s} - D_i \left|\frac{x_i^s}{B_i}\right|^{m_i} x_i^s\left|\dot{\gamma^s}\right| \tag{99}$$

avec C_i, D_i et m_i les paramètres de l'écrouissage cinématique, et $\dot{\gamma^s}$ le taux de glissement cumulé. La valeur à saturation du i[ème] écrouissage est notée $B_i = \frac{C_i}{D_i} si\ D_i \neq 0$. Il est important de remarquer que m_i contrôle le caractère fortement non-linéaire du terme de rappel. Pour la suite de l'étude, la valeur de n_{cin} est choisie égale à 2, avec $D_1 = 0$ et $C_1 = c$, pour retrouver l'écrouissage cinématique linéaire, pris dans le chapitre 2. Il est important aussi de remarquer que si m_i = 0, dans l'équation (99), l'écrouissage est de la forme du modèle d'Armstrong-Frederick ($\dot{x_i^s} = C_i\dot{\gamma^s} - D_i x_i^s\left|\dot{\gamma^s}\right|$).

L'activation du glissement plastique est décrite par la fonction seuil

$$f^s = \left|\tau^s - \sum_{i=1}^{2} x_i^s\right| - T^0 \leq 0, \tag{100}$$

où x_i^s et T^0 sont respectivement les composants de l'écrouissage cinématique et la contrainte de cisaillement initial définie au niveau du système de glissement, respectivement. Le taux de glissement viscoplastique est donné par l'équation suivante (Méric et al., 1991)

$$\dot{\gamma^s} = \dot{\gamma_0}\left\langle\frac{f^s}{K}\right\rangle^n sign\left(\tau^s - \sum_{i=1}^{n_{cin}} x_i^s\right). \tag{101}$$

Cette nouvelle loi d'écrouissage du type Ohno-Wang induit aussi une modification dans l'expression du calcul de la dissipation présentée dans le chapitre 2 (équation (67)). La

nouvelle expression de la dissipation est donnée par (en reprenant l'expression générale proposé par Busso et Cailletaud (Busso & Cailletaud, 2005))

$$\dot{D} = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_{vp} - \sum_{s=1}^{n^s} \sum_{i=1}^{2} x_i^s \, \dot{\alpha_i^s}, \tag{102}$$

où α_i^s est la variable d'état associée à l'i[ème] écrouissage cinématique. Or dans le cadre thermodynamique considéré dans cette étude, $\dot{x_i^s} = C_i \dot{\alpha_i^s}$. Cette équation peut donc être réécrite sous la forme suivante

$$\dot{D} = \underline{\underline{\sigma}} : \sum_{s=1}^{n^s} \dot{\gamma^s} \, \underline{\underline{m}}^s - \sum_{s=1}^{n^s} \sum_{i=1}^{n_{cin}} x_i^s \, (\dot{\gamma^s} - \frac{D_i}{C_i} \left| \frac{x_i^s}{B_i} \right|^{m_i} x_i^s \left| \dot{\gamma^s} \right|)$$

$$\dot{D} = \sum_{s=1}^{n^s} \left(\tau^s - \sum_{i=1}^{n_{cin}} x_i^s \right) \dot{\gamma^s} + \sum_{s=1}^{n^s} \sum_{i=1}^{n_{cin}} \frac{D_i}{C_i} \left| \frac{x_i^s}{B_i} \right|^{m_i} (x_i^s)^2 \left| \dot{\gamma^s} \right|$$

$$\dot{D} = \sum_{s=1}^{n^s} \left[\left(\tau^s - \sum_{i=1}^{n_{cin}} x_i^s \right) \dot{\gamma^s} + \sum_{i=1}^{n_{cin}} \frac{D_i}{C_i} \left| \frac{x_i^s}{B_i} \right|^{m_i} (x_i^s)^2 \left| \dot{\gamma^s} \right| \right]. \tag{103}$$

5.1.2. Schéma d'intégration semi-implicite de la loi

Pour réaliser l'implémentation numérique de la loi de comportement de plasticité cristalline, le calcul FFT (cf. sous-section 2.3.2 du chapitre 2) est aussi utilisé. Comme le VER est constitué de plusieurs voxels, il est nécessaire d'intégrer la loi de comportement pour mettre à jour les variables internes et d'évaluer le tenseur des contraintes.

Afin de garantir un bon compromis entre stabilité et coût de calcul, en particulier dans le cas de la plasticité cristalline, où le comportement est fortement non linéaire, un schéma d'intégration semi-implicite est retenu.

Les inconnues sont l'incréments de déformation élastique $\Delta \underline{\underline{\varepsilon_e}}$, l'incrément de glissement plastique $\Delta\gamma^s$, et l'incrément d'écrouissage cinématique Δx_i^s pour chaque système de glissement s entre deux instants de temps t et $t + \Delta t$. Les fonctions résidus $\underline{\underline{f_e}}$, f_{γ^s} et $f_{x_i^s}$ sont respectivement, obtenues à l'aide de la décomposition additive de la déformation, du glissement et de l'écrouissage issue des équations (99) et (101). Ces fonctions sont données, dans le repère du cristal, par

$$\begin{cases} \underline{\underline{f_e}} = \Delta\underline{\underline{\varepsilon_e}} - \Delta\underline{\underline{\varepsilon}} + \sum_{s=1}^{n^s} \Delta\gamma^s \underline{\underline{m^s}} \\ f_{\gamma^s} = \Delta\gamma^s - signe(\tau^s_{t+\theta\Delta t} - x^s_{t+\Delta t})\Delta t\, \dot{\gamma}_0 \left\langle \frac{|\tau^s_{t+\theta\Delta t} - x^s_{t+\theta\Delta t}| - T^0}{K} \right\rangle^n \\ f_{x_i^s} = \Delta x_i^s - C_{\mathrm{i}}\Delta\gamma^{\mathrm{s}} + D_{\mathrm{i}} \left| \frac{(x_i^s|_{\mathrm{t}} + \theta\Delta x_i^s)}{B_{\mathrm{i}}} \right|^{m_i} (x_i^s|_{\mathrm{t}} + \theta\Delta x_i^s)\, |\Delta\gamma^{\mathrm{s}}| \end{cases} \quad (104)$$

Les variables sont actualisées de la façon suivante

$$\begin{cases} \underline{\underline{\sigma_{t+\Delta t}}} = \underline{\underline{\sigma_t}} + \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} : \Delta\underline{\underline{\varepsilon_e}} \\ \tau^s_{t+\Delta t} = \underline{\underline{\sigma_{t+\Delta t}}} : \underline{\underline{m^s}} \end{cases} \quad (105)$$

La méthode de Newton est utilisée pour résoudre le système. La matrice jacobienne J se met sous la forme

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial \underline{\underline{f_e}}}{\partial \Delta\underline{\underline{\varepsilon_e}}} & \cdots & \frac{\partial \underline{\underline{f_e}}}{\partial \Delta\gamma_j^s} & \cdots & \cdots & \frac{\partial \underline{\underline{f_e}}}{\partial \Delta x_j^s} & \cdots \\ \vdots & \ddots & \cdots & \iddots & \ddots & \cdots & \iddots \\ \frac{\partial f_{\gamma^s}}{\partial \Delta\underline{\underline{\varepsilon_e}}} & & \frac{\partial f_{\gamma^s}}{\partial \Delta\gamma_j^s} & & & \frac{\partial f_{\gamma^s}}{\partial \Delta x_j^s} & \\ \vdots & \iddots & \cdots & \ddots & \iddots & \cdots & \ddots \\ \vdots & \ddots & \cdots & \iddots & \ddots & \cdots & \iddots \\ \frac{\partial f_{x_j^s}}{\partial \Delta\underline{\underline{\varepsilon_e}}} & & \frac{\partial f_{x_i^s}}{\partial \Delta\gamma_j^s} & & & \frac{\partial f_{x_i^s}}{\partial \Delta x_j^s} & \\ \vdots & \iddots & \cdots & \ddots & \iddots & & \ddots \end{bmatrix} \quad (106)$$

avec

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial f_e}{\partial \Delta \underline{\underline{\varepsilon}}_e} = \underline{\underline{\underline{\underline{I}}}} \\
\dfrac{\partial f_e}{\partial \Delta \gamma_j^s} = \underline{\underline{m}}^s \\
\dfrac{\partial f_e}{\partial \Delta x_j^s} = \underline{\underline{0}} \\
\dfrac{\partial f_{\gamma^s}}{\partial \Delta \underline{\underline{\varepsilon}}_e} = -\theta \Delta t \dot{\gamma}_0 \dfrac{n}{K} \left\langle \dfrac{|\tau_{t+\theta\Delta t}^s - x_{t+\theta\Delta t}^s| - T^0}{K} \right\rangle^{n-1} \underline{\underline{m}}^s : \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} \\
\dfrac{\partial f_{\gamma^s}}{\partial \Delta \gamma_j^s} = \delta_{ij} \\
\dfrac{\partial f_{\gamma^s}}{\partial \Delta x_j^s} = \dfrac{\partial f_{\gamma^s}}{\partial \Delta \gamma_j^s} = \theta \Delta t \dot{\gamma}^0 \dfrac{n}{K} \left\langle \dfrac{|\tau_{t+\theta\Delta t}^s - x_{t+\theta\Delta t}^s| - \tau T^0}{K} \right\rangle^{n-1} \delta_{sj} \\
\dfrac{\partial f_{x_j^s}}{\partial \Delta \underline{\underline{\varepsilon}}_e} = \underline{\underline{0}} \\
\dfrac{\partial f_{x_i^s}}{\partial \Delta \gamma_j^s} = \left(-C_i + D_i \left| \dfrac{(x_i^s|_t + \theta \Delta x_i^s)}{B_i} \right|^{m_i} (x_i^s|_t + \theta \Delta x_i^s)\, signe(\Delta \gamma^s) \right) \delta_{sj} \\
\dfrac{\partial f_{x_i^s}}{\partial \Delta x_j^s} = \left(1 + \theta(1+m_i) D_i \left| \dfrac{(x_i^s|_t + \theta \Delta x_i^s)}{B_i} \right|^{m_i} |\Delta \gamma^s| \right) \delta_{sj}
\end{cases}
\tag{107}
$$

L'actualisation des inconnues entre les incréments *k* et *k + 1* de la méthode de Newton sont alors données par

$$
\begin{bmatrix} \Delta \underline{\underline{\varepsilon}}_e \\ \vdots \\ \Delta \gamma^s \\ \vdots \\ \Delta x_i^s \\ \vdots \end{bmatrix}_{k+1} = \begin{bmatrix} \Delta \underline{\underline{\varepsilon}}_e \\ \vdots \\ \Delta \gamma^s \\ \vdots \\ \Delta x_i^s \\ \vdots \end{bmatrix}_{k} - J_k^{-1} \begin{bmatrix} \underline{\underline{f_e}} \\ \vdots \\ f_{\gamma^s} \\ \vdots \\ f_{x_i^s} \\ \vdots \end{bmatrix}_{k}
\tag{108}
$$

Puis la dissipation est obtenue par

$$
D_{t+\Delta t} = D_t + \sum_{s=1}^{n^s} \left[\left(\tau_{t+\theta\Delta t}^s - \sum_{i=1}^{n_{cin}} \Delta x_i^s \right) \Delta \gamma^s + \sum_{i=1}^{n_{cin}} \frac{D_i}{C_i} \left| \frac{x_{t+\theta\Delta t}^s}{B_i} \right|^{m_i} (\Delta x_i^s)^2 |\Delta \gamma^s| \right].
\tag{109}
$$

Pour cette étude, les paramètres matériau n, K et $C_1 = \mathrm{c}$ sont conservés identiques à ceux utilisés lors du chapitre 2. Le paramètre θ est égal à 0,5. L'introduction de l'écrouissage de type Ohno–Wang (OW) a pour objectif principal de permettre la génération de dissipation à faible amplitude sans modifier significativement le comportement macroscopique. La Figure 97 rappelle le protocole retenu pour la choix des paramètres d'Ohno-Wang et sa comparaison

avec le résultat du chapitre 2 avec un écrouissage cinématique linéaire de type Prager (Prager, 1956).

Ainsi, la valeur de la contrainte de cisaillement initiale définie au chapitre 2, $\tau^0 = 40\ MPa$, est « maintenue ». Cette valeur correspond à la contrainte atteinte après la saturation du deuxième écrouissage (x_2^S) conformément à la relation suivante :

$$\tau^0 = T^0 + \frac{C_2}{D_2} \qquad (110)$$

Ainsi, le rapport $\frac{C_2}{D_2}$ est choisi de manière à garantir la même valeur de τ^0 que dans le modèle précédent, ce qui permet de conserver un $Rp_{0.2}$ très proche. Puis la valeur de C_2 est choisie de manière à obtenir un comportement macroscopique élastique équivalent à celui observé au chapitre 2. Autrement dit, le module d'Young apparent, E, doit rester proche de la valeur obtenue précédemment (cf. chapitre 2, $E = 211{,}90 \pm 0{,}59\ GPa$). Dans le chapitre 5 pour les mêmes plages de déformation (0,01%-0,03%), la valeur de $E = 210{,}76\ GPa$. Le choix de la valeur de m_2=10 ainsi que celui de $\mathrm{T}^0 = 10\ MPa$ sera justifié dans les sections suivantes.

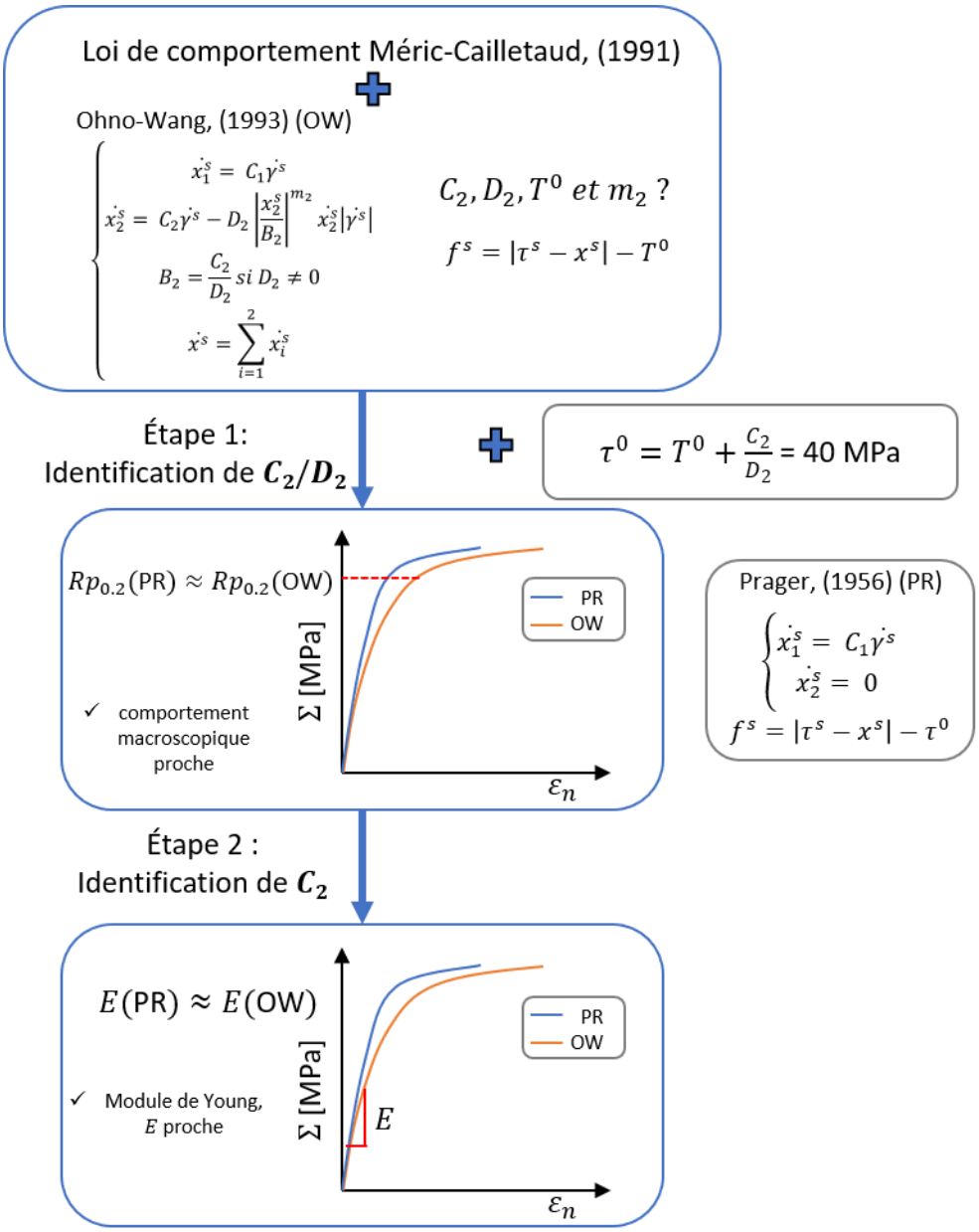


Figure 97. Protocole de détermination de C_2 et D_2, paramètres de la loi de Ohno-Wang

L'ensemble des paramètres matériaux ainsi calibrés sont présentés dans le Tableau 6 et le Tableau 7 . L'étude de sensibilité des paramètres de OW sera détaillée dans les sections suivantes.

Paramètres	$C_{11}(GPa)$	$C_{12}(GPa)$	$2C_{44}(GPa)$	$T^0(MPa)$	$K(MPa)$	n	$\dot{\gamma}_0$	Z_n
Valeurs	231,5	135	232	10	2	11	1	2,4

Tableau 6. Paramètres élastiques et visco-plastiques du matériau virtuel de l'étude

Paramètres OW	$C_1(MPa)$	$C_2(MPa)$	$D_1(MPa)$	D_2	m_1	m_2
Valeurs	10000	30×10^6	0	10^6	0	10

Tableau 7. Paramètres de la loi d'écrouissage d'Ohno-Wang du matériau virtuel de l'étude

5.1.3. Étude de la loi 1D

Dans cette section, une étude 1D de la courbe d'écrouissage x_2^s (cf. équation (99)) 1D de type Ohno-Wang est réalisée pour un seul système de glissement. Pour l'ensemble des simulations, les paramètres utilisés, sauf indication contraire, sont ceux disponibles dans le Tableau 6 et dans le Tableau 7. Une étude de sensibilité des trois paramètres est réalisée comme suit : m_2, C_2/D_2 et C_2.

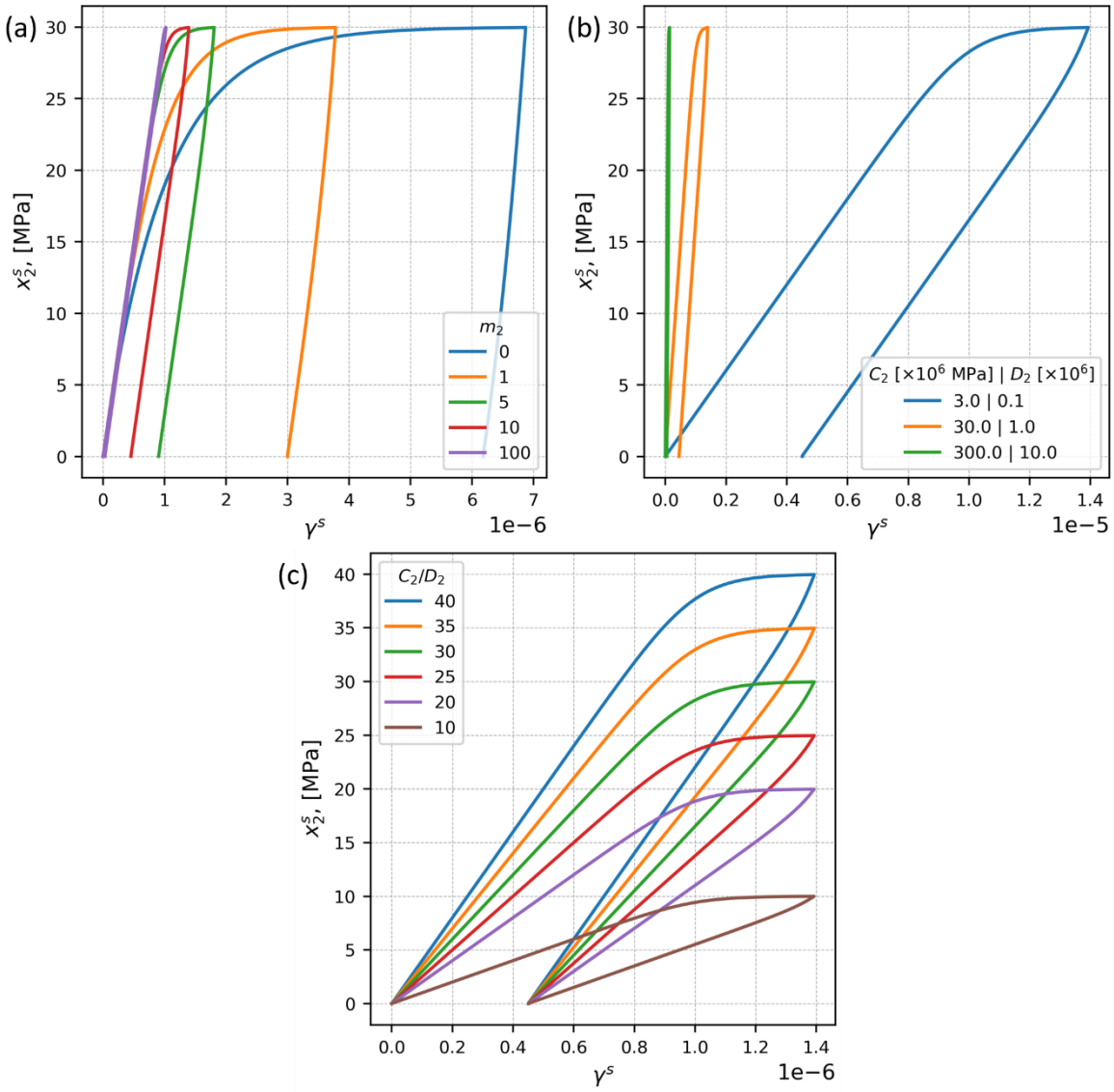


Figure 98. Évolution de l'écrouissage pour la loi 1d (a) $m_2 \in \{0, 1, 5, 10,100\}$, $C_2 = 30 \times 10^6 MPa$ et $D_2 = 10^6$ (b) m_2 =10, $C_2 \in \{3, 30, 300\} \times 10^6 MPa$ et $D_2 \in \{0.1, 1, 10\} \times 10^6$ (c) m_2 = 10, $C_2/D_2 \in \{40, 35, 30, 25, 20, 10\}$ MPa et $D_2 = 10^6$

La Figure 98(a) présente une étude de sensibilité du paramètre m_2. L'augmentation de m_2 réduit le glissement plastique pour un même niveau d'écrouissage. Une forte non-linéarité de l'écrouissage apparaît dès que $m_2 \neq 0$, comme l'indique la courbure introduite par ce paramètre. En revanche, pour $m_2 = 0$, la loi d'OW se réduit à la loi d'AF, ce qui atténue nettement le caractère non linéaire de l'écrouissage. Par ailleurs, des valeurs élevées de m_2 conduisent à une saturation plus rapide de l'écrouissage.

Sur la Figure 98(c), le rapport C_2/D_2 varie, avec D_2 constant et en conservant un m_2 à 10. Comme on pouvait s'y attendre ce rapport change la valeur à saturation.

Sur la Figure 98(b), C_2 est changé en gardant le ratio C_2/D_2 constant à 30 MPa. La valeur à saturation reste donc bien identique mais la pente avant saturation change énormément.

5.2. Agrégat polycristallin soumis à un chargement uniaxial de traction-compression

Dans cette section, les premiers résultats issus des chargements uniaxiaux de traction-compression obtenus après introduction de l'écrouissage d'Ohno-Wang seront analysés.

Dans un premier temps, l'étude porte sur les champs de contraintes globaux et locaux pour des amplitudes de contrainte de 90 MPa et de 150 MPa. Dans un second temps, une analyse de sensibilité des paramètres de la loi d'écrouissage OW sur la dissipation moyenne par cycle est menée**.**

5.2.1. Comportement mésoscopique : évolution de la contrainte nominale

Comme présenté au chapitre 2, l'étude de la contrainte nominale et de la déformation sont définies sur trois zones différentes : échelle de l'agrégat, celle du grain et celle du voxel (cf. chapitre 2, équation (80)). Les conditions aux limites appliquées sont identiques à celles décrites au chapitre 2, avec un rapport de charge de R = -1 et une simulation de 1,5 cycles.

Contrairement au chapitre 2, un seul tirage d'orientation et de tessellation a été proposé, pour un chargement cyclique du type triangulaire, de fréquence de chargement de 0,25 Hz et des amplitudes de contrainte (Σ_0) de 90 MPa et 150 MPa.

La Figure 99 compare l'évolution de la contrainte nominale, Σ, en fonction de la déformation macroscopique pour la loi de comportement utilisée au chapitre 2 avec une écrouissage cinématique linéaire de type Prager (PR) (Prager, 1956) et celle complétée d'un écrouissage de type de Ohno-Wang (OW). D'un point de vue macroscopique, les deux lois présentent un comportement globalement similaire, avec des niveaux de déformation très proches pour une même amplitude de contrainte.

La Figure 100 illustre ensuite l'évolution des boucles d'hystérésis contrainte–déformation pour une amplitude de 90 MPa sur 5 cycles pour la loi de comportement de Méric-Cailletaud avec écrouissage du type Ohno-Wang (OW)**.** La stabilisation du chargement est atteinte dès le premier cycle.

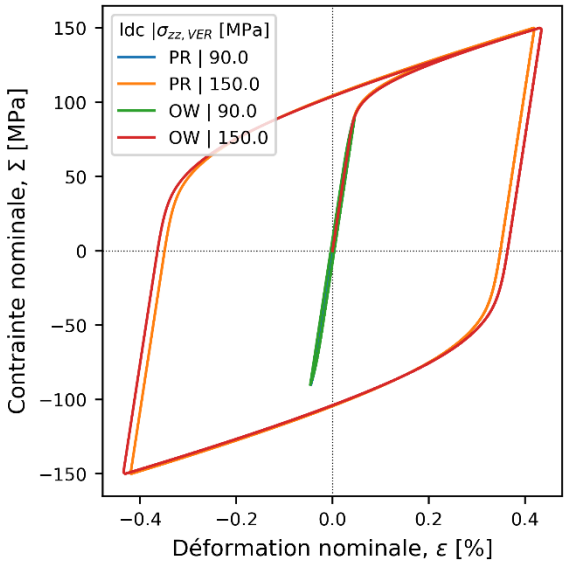


Figure 99. Évolution de la contrainte nominale en fonction de la déformation macroscopique pour 1,5 cycles, sous des amplitudes de contrainte de 90 MPa et de 150 MPa, pour un tirage d'orientation unique. Comparaison entre les lois de comportement de Méric-Cailletaud avec écrouissage de type Prager (PR) et de type Ohno–Wang (OW).

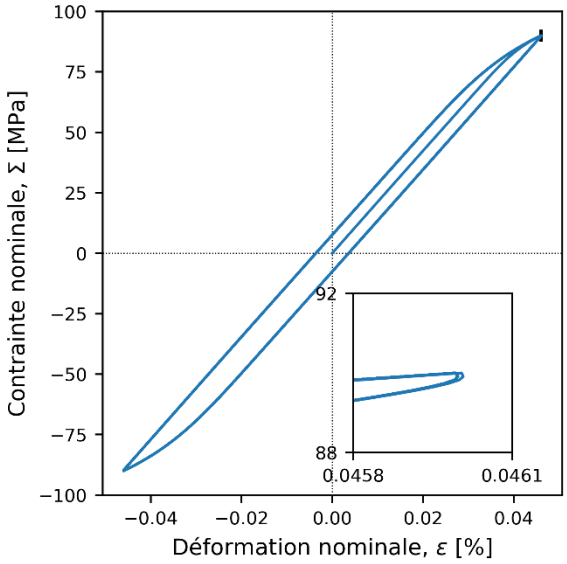


Figure 100. Évolution des boucles d'hystérésis contrainte–déformation pour une amplitude de 90 MPa et 5 cycles, à une fréquence de chargement f = 0,25 Hz pour la loi de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage de type Ohno–Wang (OW).

5.2.2. Évolution de la dissipation intrinsèque moyenne par cycle

Pour le calcul de la dissipation moyenne par cycle, l'équation (103) a été calculée dans un cycle à partir de l'équations (82) et (83) du chapitre 2. La Figure 102 montre l'évolution de la dissipation moyenne par cycle en échelle logarithmique pour des plages d'amplitudes comprises entre 50 MPa et 90 MPa. Comme observé au chapitre 2, lorsque l'amplitude de contrainte est augmentée, l'hétérogénéité des valeurs de dissipation par voxel s'accentue.

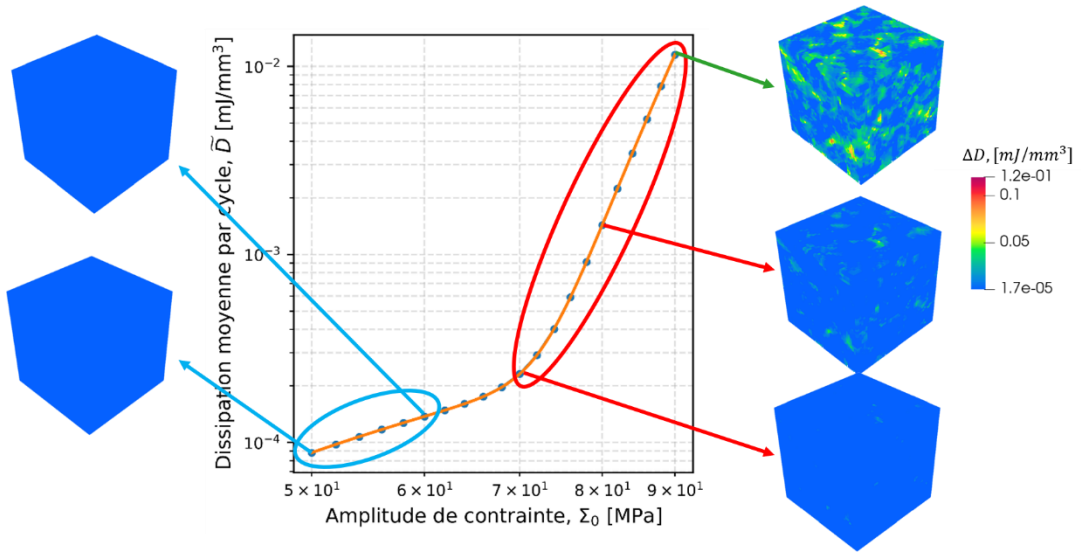


Figure 101. Évolution de la dissipation moyenne par cycle en échelle logarithmique de la dissipation moyenne par cycle pour chaque voxel, ΔD pour des amplitudes de 50 MPa, 56 MPa, 70 MPa, 80 MPa et 90 MPa.

L'évolution de la dissipation en fonction de l'amplitude du chargement est ensuite analysée et met en évidence deux régimes distincts. Pour des amplitudes comprises entre 50 MPa et 60 MPa, la pente moyenne obtenue est de 2,43, tandis que pour des amplitudes plus élevées (entre 75MPa et 90 MPa) elle atteint une valeur moyenne de 17,7 (Figure 102(b)). Cette fois une grande différence apparait pour les faibles amplitudes : la présence d'un autre régime qui ressemble au régime primaire des courbes d'auto-échauffement (pente moyenne proche de 2) (Munier et al., 2014). En outre, il est important de noter aussi le caractère diffus de l'hétérogénéité des valeurs de dissipation à faibles amplitudes pour le régime primaire (Figure 101). Ce résultat est en accord avec les observations réalisées à l'échelle expérimental pour Munier et Amini (Amini, 2021; Munier, 2012), présentées au chapitre 2.

La Figure 102(c) illustre la stabilité de la pente locale (cf. équation (90) du chapitre 3) pour des amplitudes comprises entre 50 MPa et 65 MPa. Il peut être noté la présence d'une région de transition, dans laquelle la pente augmente fortement (entre 65 MPa et 80 MPa), ainsi qu'une zone où la pente se stabilise (à partir de 80 MPa).

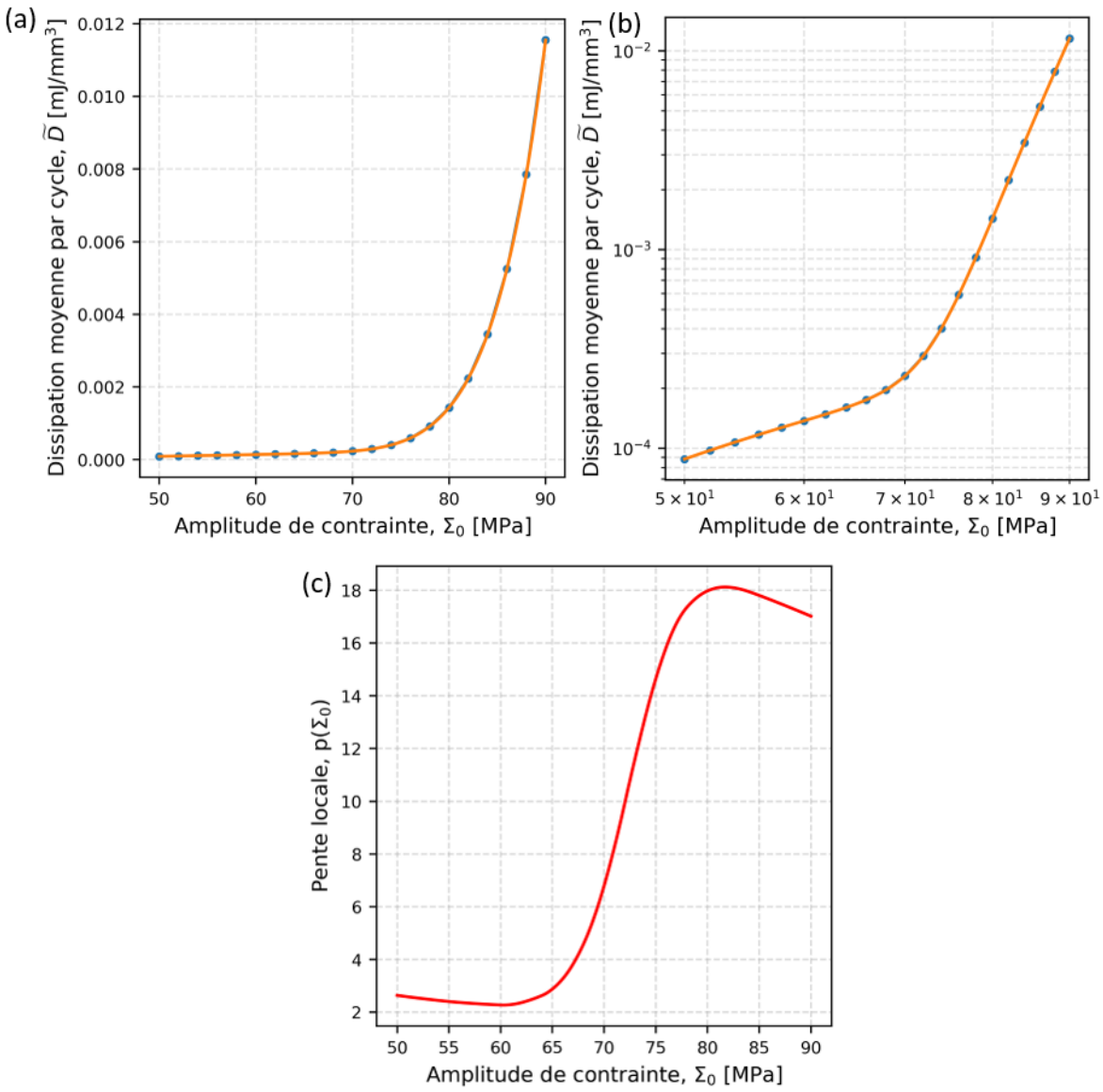


Figure 102. Évolution de la dissipation moyenne par cycle pour un VER de 625 grains. (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique (c) évolution de la pente locale de la dissipation moyenne par cycle.

Ce résultat présente un caractère original, car il s'agit de la première étude dans laquelle, pour un tirage d'orientation et de tessellation donné, une loi de plasticité cristalline de type Méric–Cailletaud associée à un écrouissage cinématique de type Ohno–Wang est utilisée pour analyser la dissipation moyenne par cycle. Cette approche a permis de mettre en évidence deux régimes distincts de dissipation, dont les pentes présentent des ordres de grandeur comparables à ceux observés expérimentalement pour les régimes primaire et secondaire des courbes d'auto-échauffement. Ce résultat vient compléter l'étude des phénomènes dissipatifs présenté aux chapitres 2, 3 et 4.

La Figure 103 montre, pour un même tirage d'orientation, une comparaison avec les résultats issus du chapitre 3, obtenus avec une écrouissage cinématique linéaire de type Prager (Prager, 1956) (PR). Le comportement à faibles amplitudes est bien différent, tandis

qu'un comportement similaire (courbes parallèles en échelle logarithmique) est retrouvé pour les hautes amplitudes.

Le principal avantage de cette modification de la loi d'écrouissage réside dans l'obtention de niveaux de dissipation à faibles amplitudes permettant de faire apparaitre un régime primaire d'auto-échauffement, en accord avec les plages de dissipation trouvée expérimentalement, comme indiqué sur la Figure 6 du chapitre 1.

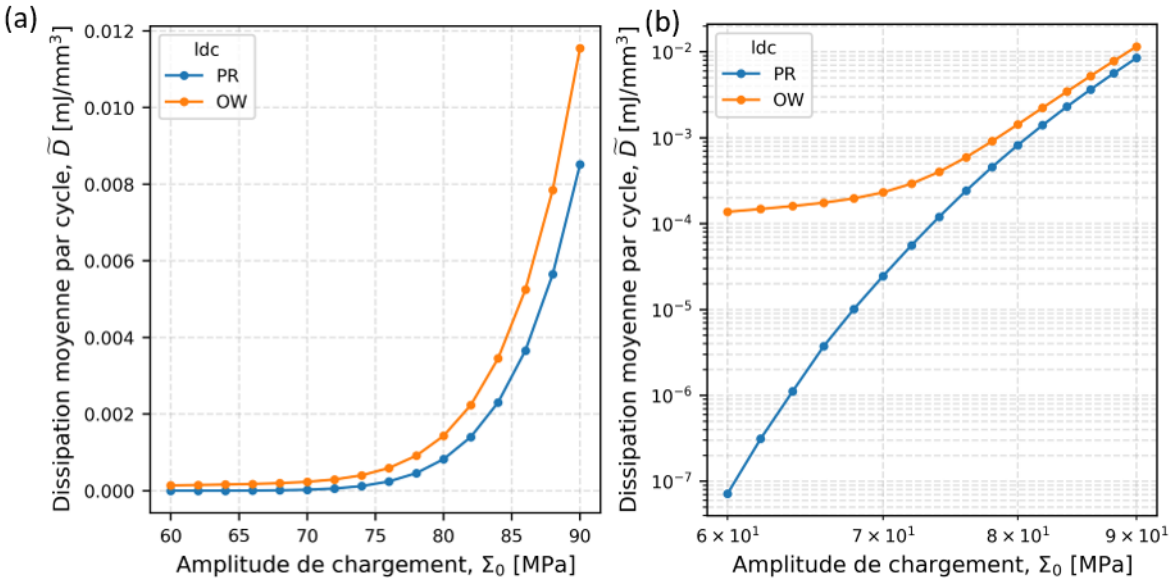


Figure 103. Comparaison de la dissipation moyenne par cycle. Loi de comportement de Méric-Cailletaud avec écrouissage du type Prager (PR) en ligne bleue et Ohno-Wang (OW) en ligne orange (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique pour un même tirage d'orientation et de tessellation.

5.3. Influence des paramètres de la loi de comportement

Dans cette section, l'étude de la sensibilité des paramètres de la loi de comportement, plus précisément de ceux de la loi d'écrouissage de type Ohno–Wang (m_2 , T^0 , C_2 et D_2) a été réalisé au regard de l'évolution de la contrainte nominale et aussi de la dissipation moyenne par cycle.

5.3.1. Influence de m_2

Les valeurs de m_2 étudiés sont comprises entre 0 et 100. La Figure 104 montre une évolution de la contrainte nominale avec un écrouissage cinématique linéaire de type Prager (PR) et l'écrouissage cinématique non-linéaire de type Ohno-Wang (OW). Il est notable que l'influence sur la réponse macroscopique de l'agrégat reste faible. Le module d'Young apparent, E, a été calculé pour des plages de déformation très faibles (0,001% à 0,002%) donnant la valeur de 212,3 GPa.

La Figure 105, représente pour des valeurs de m_2 comprises entre 0 et 100, la contrainte nominale en fonction de la déformation plastique ($\varepsilon_p = \varepsilon_t - \sigma/E$). Cette

représentation permet d'illustrer l'apport de l'écrouissage de type OW par rapport à l'écrouissage de type PR. Il peut être noté que l'initiation de la plasticité débute plutôt pour OW. Ce comportement s'explique par la valeur du seuil T^0 plus faible pour OW comparé au seuil τ^0 pour PR. Il est également notable que, pour les valeurs de m_2 plus importantes, la saturation de l'écrouissage est atteinte plus rapidement.

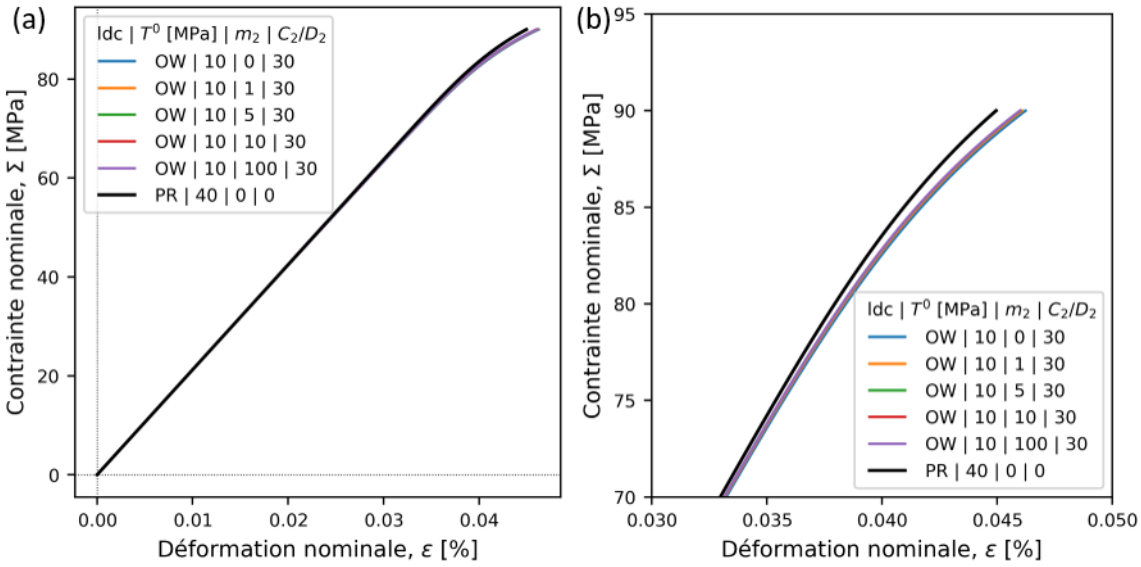


Figure 104. Évolution de la contrainte nominale versus déformation nominale pour les lois de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage de type de Ohno-Wang (OW) et de type Prager (PR) pour $m_2 \in \{0, 1, 5, 10,100\}$ et (b) et un zoom entre 70 et 90 MPa pour un chargement monotone de 90 MPa.

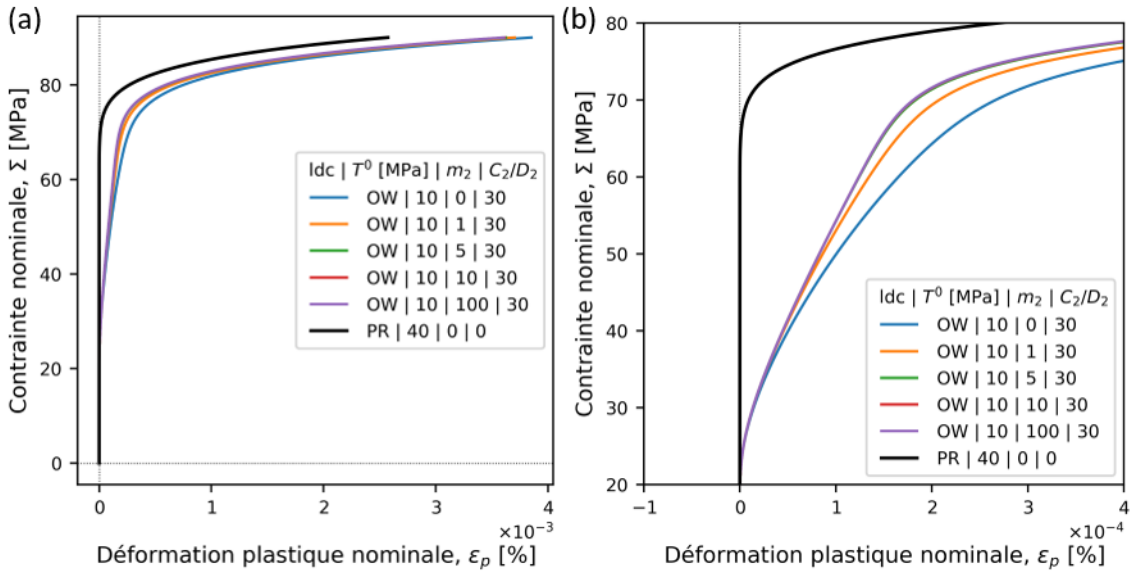


Figure 105. (a) Évolution de la contrainte nominale pour les lois de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage de type de Ohno-Wang (OW) et de type Prager (PR) pour $m_2 \in \{0, 1, 5, 10,100\}$ (b) et un zoom entre 20 à 80 MPa pour un chargement monotone de 90 MPa.

Une analyse sur l'évolution de la pente du premier régime de la courbe d'auto-échauffement est menée pour des valeurs de m_2 comprises entre 0 et 10. Sur la Figure 106(a-b), il est possible de constater que pour des valeurs de m_2 plus élevées, la dissipation associée

au premier régime diminue, car la déformation plastique macroscopie est plus faible (Figure 105(a)). En revanche, pour le deuxième régime, l'influence de m_2 est quasi négligeable. À 90 MPa, pour toutes les plages de valeur de m_2 étudiés, des niveaux de dissipation très proches sont trouvés. Ce comportement est attendu, puisque pour cette amplitude de contrainte, l'écrouissage de type OW ajouté est complètement saturé.

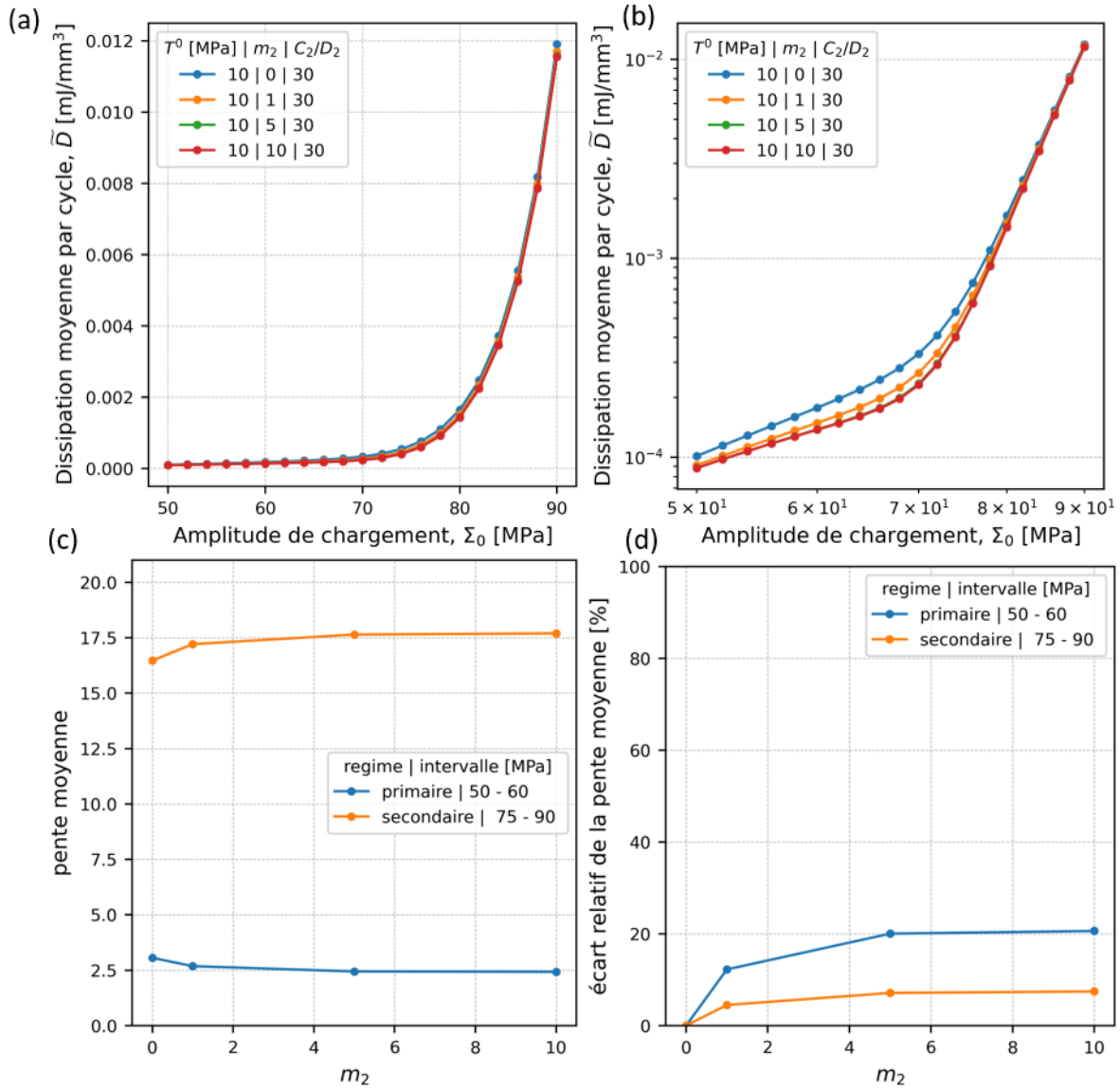


Figure 106. (a) Évolution de la dissipation moyenne par cycle nominale pour la loi de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage de type de Ohno-Wang (OW) pour les valeurs de $m_2 \in \{0, 1, 5, 10\}$ (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique (c) évolution de la pente du régime primaire et du régime secondaire (d) évolution de l'écart relatif de la pente moyenne.

Sur Figure 106(c) et sur le Tableau 8, il est possible d'étudier les valeurs absolues de la pente moyenne du premier et du deuxième régime liée aux courbes présentent sur la Figure 106(a,b). Comme rappelé au chapitre 2, la pente caractérisant le régime primaire est généralement proche de 2 pour la majorité des alliages métalliques étudiés

expérimentalement (Munier et al., 2014). Dans cette optique, il est pertinent d'examiner avec précision les valeurs obtenues numériquement.

Ainsi, la Figure 106(d) présente l'écart relatif de la pente moyenne par rapport au cas de référence m_2 = 0, pour des valeurs de m_2 comprises entre 0 et 10. Il est possible de constater que cet écart est plus important pour le premier régime que pour le régime secondaire, indiquant une sensibilité plus importante de la pente du régime primaire au paramètre m_2. Il est important de rappeler que pour $m_2 = 0$, la loi d'écrouissage est équivalente à celle d'Armstrong–Frederick, et conduit à une pente de 3,03, tandis qu'avec la loi de Ohno–Wang pour m_2=10, la pente associée au premier régime atteint une valeur de 2,43.

Les valeurs disposées sur le Tableau 8 et sur la Figure 106 (c,d) montrent ainsi que la formulation de Ohno–Wang est plus adaptée pour décrire le régime primaire que la loi d'Armstrong–Frederick, en conduisant à des valeurs de pente plus proches de 2, valeur généralement observée expérimentalement. Pour les faibles amplitudes de chargement, le paramètre m_2 exerce donc une influence significative sur la pente du premier régime.

		Pente moyenne	
$T^0(MPa)$	m_2	Primaire (50 – 60 MPa)	Secondaire (75 – 90 MPa)
10	0	3,06	16,47
10	1	2,68	17,21
10	5	2,44	17,64
10	10	2,43	17,70

Tableau 8. Évolution de la pente pour le régime primaire et le régime secondaire pour la loi de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage de type Ohno-Wang (OW) pour les valeurs de m_2 comprises entre 0 et 10.

5.3.2. Influence de T^0 et C_2/D_2

Dans cette étape, l'analyse est étendue à d'autres paramètres de la loi d'écrouissage de type Ohno-Wang (OW). Les paramètres T^0 et le rapport C_2/D_2 sont étudiés conjointement, de sorte que la somme de ces deux termes reste constante et égale à 40 MPa (cf. l'équation (110)), tandis que la valeur de m_2 est maintenue fixe à 10.

Comme l'illustre la Figure 107, l'influence de ces paramètres sur la réponse macroscopique contrainte nominale – déformation nominale demeure faible. Cependant, lorsque la déformation plastique est tracée (Figure 108), il apparaît qu'une augmentation la valeur de T^0 retarde l'apparition de la déformation plastique.

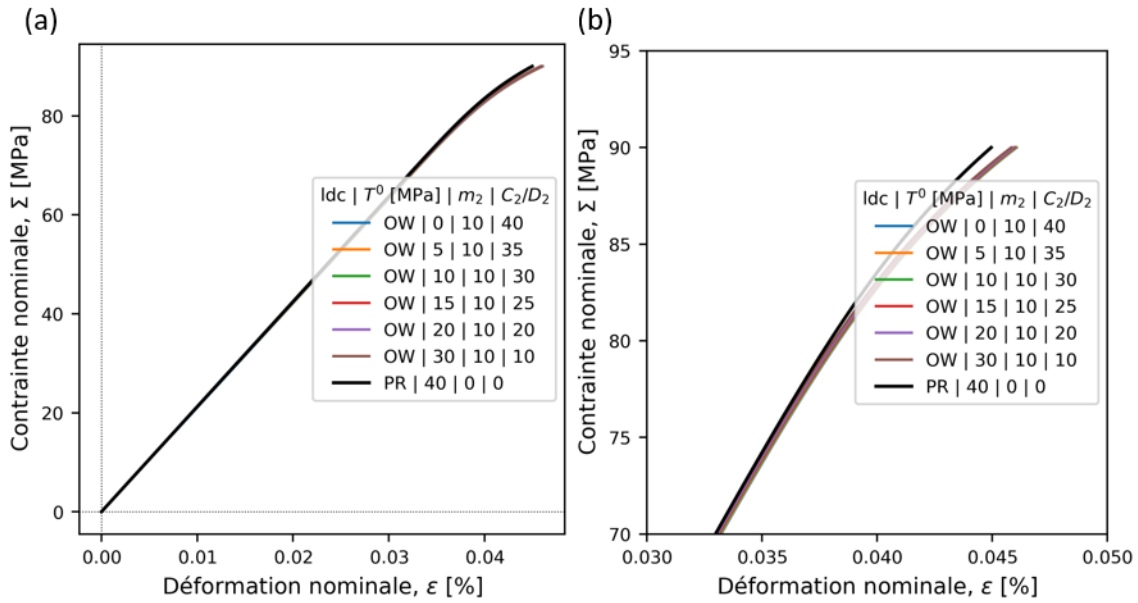


Figure 107. Évolution de la contrainte nominale – déformation nominale pour les lois de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage de type de Ohno-Wang (OW) et de type Prager (PR) pour $T^0 \in \{0, 5, 10, 15, 20, 30\}$ MPa et $C_2/D_2 \in \{40, 35, 30, 25, 20, 10\}$ MPa pour un chargement monotone de 90 MPa.

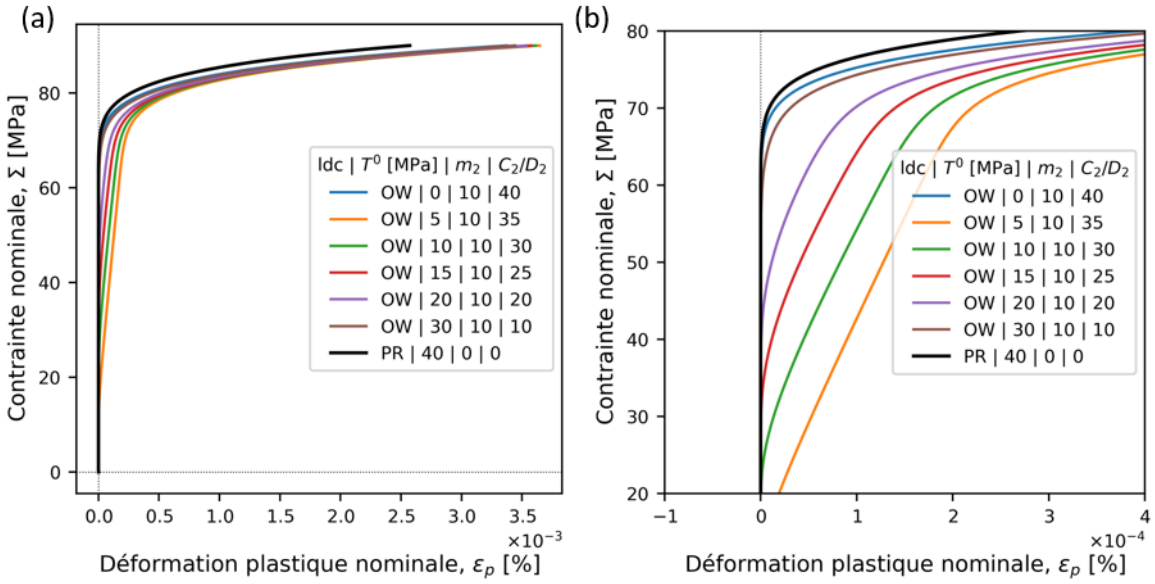


Figure 108. (a) Évolution de la contrainte nominale – déformation plastique nominale pour les lois de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage de type de Ohno-Wang (OW) et de type Prager (PR) pour $T^0 \in \{0, 5, 10, 15, 20, 30\}$ MPa et $C_2/D_2 \in \{40, 35, 30, 25, 20, 10\}$ MPa (b) et un zoom entre 20 et 80 MPa pour un chargement monotone de 90 MPa.

Un autre aspect essentiel concerne la dissipation moyenne par cycle. En traçant cette dernière (Figure 109) pour les différents jeux de paramètres exposés dans le Tableau 9, il est évident que les valeurs de T^0, telles que 15, 20 et 30 ne permettent pas de reproduire des pentes du première régime compatibles avec les observations expérimentales (Munier et al., 2014). Les résultats les plus cohérents sont obtenus pour des valeurs de T^0 comprises entre 5 et 10. Ces valeurs conduisent respectivement à des pentes de 1,57 et 2,43. Par ailleurs, la Figure 109(a,b) met en évidence que la variation de ces paramètres n'affecte pas

significativement l'intensité du premier régime de dissipation pour T^0 comprises entre 5 et 15.

		Pente Moyenne	
$T^0(MPa)$	C_2/D_2	Primaire (50 - 60 MPa)	Secondaire (75 - 90 MPa)
0	40	-	20,02
5	35	1,57	18,40
10	30	2,43	17,70
15	25	4,02	17,52
20	20	7,41	17,74
30	10	-	19,10

Tableau 9. Évolution de la pente pour le régime primaire et le régime secondaire pour des valeurs de $T_0 \in \{0, 5, 10, 15, 20, 30\}$ MPa et $C_2/D_2 \in \{40, 35, 30, 25, 20, 10\}$ MPa

Ainsi, sur la Figure 109(c) pour un exposant m_2 fixé à 10, il est possible de conclure que les valeurs optimales de T^0 se situent entre 5 et 10, afin d'obtenir une pente du premier régime en accord avec les régimes primaires des courbes d'auto-échauffement expérimentales.

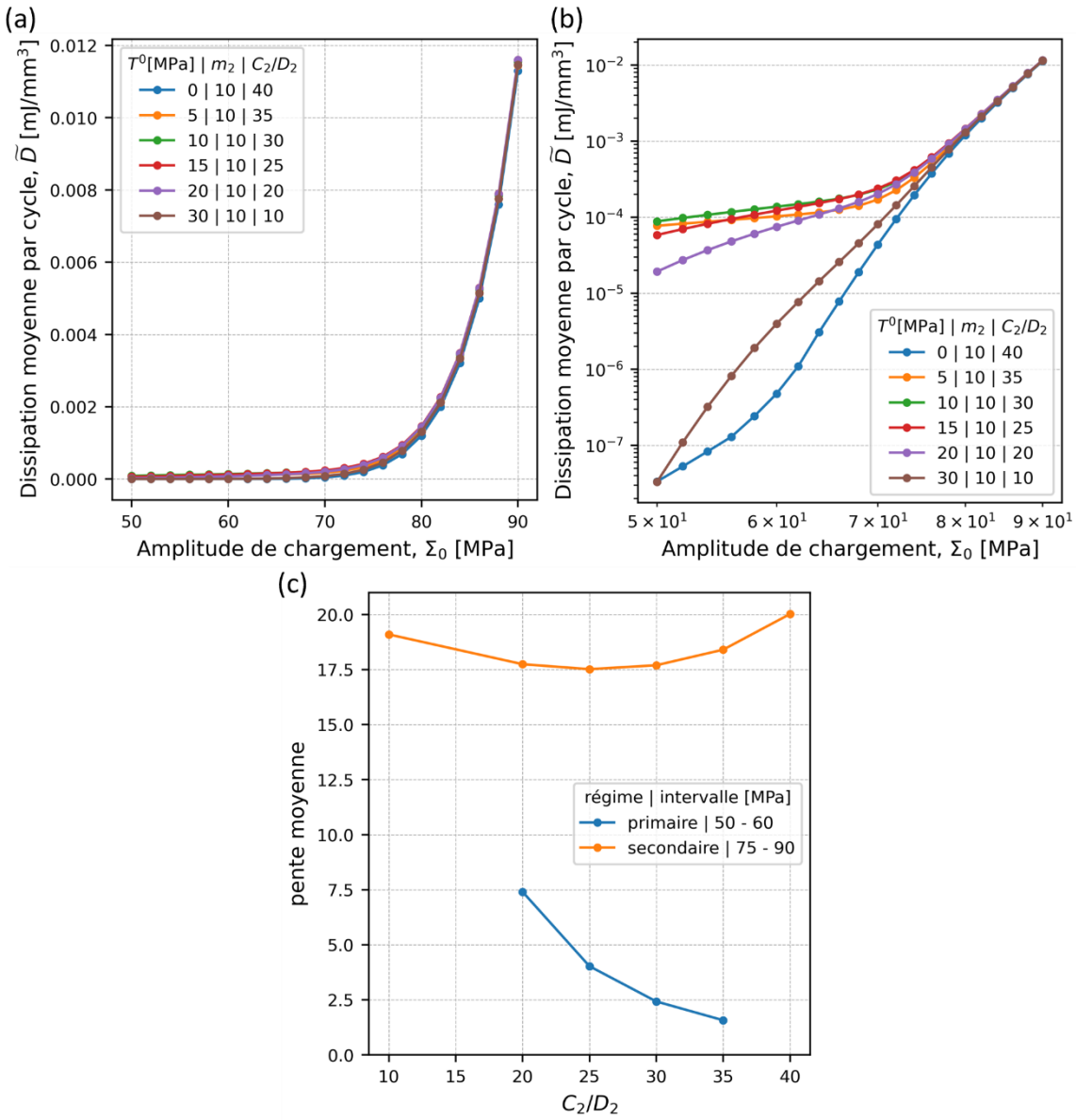


Figure 109. (a) Évolution de la dissipation moyenne par cycle pour une loi de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage du type Ohno-Wang (OW) pour des valeurs de $T_0 \in \{0, 5, 10, 15, 20, 30\}$ MPa et $C_2/D_2 \in \{40, 35, 30, 25, 20, 10\}$ MPa (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique (c) évolution de la pente du régime primaire et du régime secondaire

5.3.3. Influence de C_2 et D_2

Dans cette étape, l'influence des coefficients C_2 et D_2 sur l'évolution de la contrainte nominale et de la dissipation moyenne par cycle est analysée. Les valeurs de ces deux paramètres ont été systématiquement modifiées tout en maintenant leur rapport constant, à $C_2/D_2 = 30$ MPa.

Ces deux paramètres exercent une influence sur le module d'Young apparent, E. Dans le Tableau 10, il est possible voir les différentes valeurs de E pour deux plages de déformations. Entre 0,001% – 0,002%, ils ont le même module de Young, mais pour les plages plus larges, comme 0,01% – 0,03% la valeur change.

La Figure 110 met en évidence que l'augmentation simultanée de C_2 et D_2 provoque un décalage vers la gauche de la courbe contrainte–déformation, ce qui se traduit par une réduction de la déformation pour une même contrainte nominale. En examinant la déformation plastique (Figure 111), il apparaît que les combinaisons contenant les plus faibles valeurs de C_2 et D_2 engendrent également des niveaux de déformation plastique plus grands.

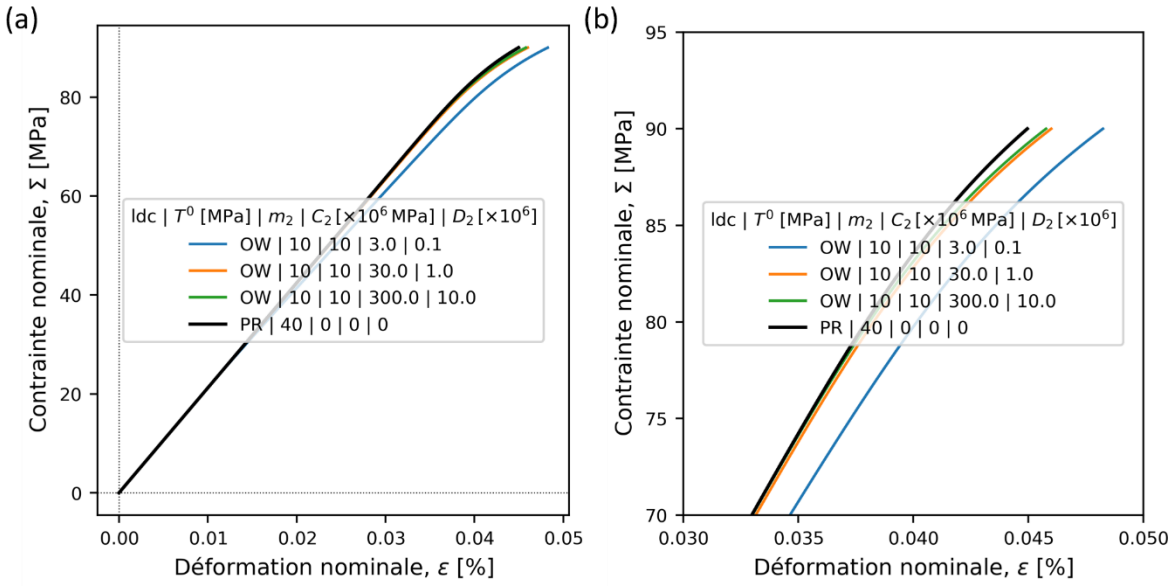


Figure 110. Évolution de la contrainte nominale – déformation nominale pour les lois de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage de type Ohno-Wang (OW) et de type Prager (PR) pour des valeurs de $C_2 \in \{3, 30, 300\} \times 10^6$MPa et $D_2 \in \{0.1, 1, 10\} \times 10^6$.

			E [GPa]	
$T^0(MPa)$	C_2 [$\times 10^6$ MPa]	D_2 [$\times 10^6$]	ε(0,001-0,002) %	ε(0,01-0,03) %
10	3	0,1	212,3	198,15
10	30	1,0	212,3	210,76
10	300	10,0	212,3	212,14

Tableau 10. Valeurs de module d'Young apparent, E calculé entre 0,001% et 0,002% de la déformation nominale

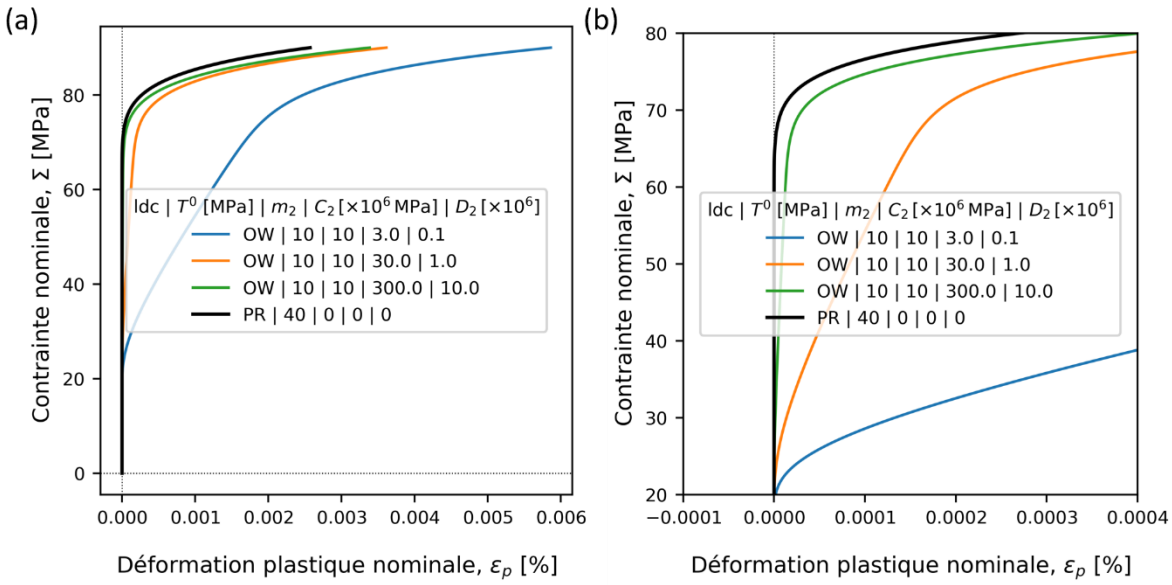


Figure 111. (a) Évolution de la contrainte nominale – déformation plastique nominale pour les lois de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage de type Ohno-Wang (OW) et de type Prager (PR) pour des valeurs de $C_2 \in \{3, 30, 300\} \times 10^6$MPa et $D_2 \in \{0.1, 1, 10\} \times 10^6$ (b) et un zoom entre 20 et 80 MPa pour un chargement monotone de 90 MPa

Par ailleurs, l'impact de C_2 et D_2 sur la dissipation moyenne par cycle est présenté dans la Figure 112(a,b). Bien que ces paramètres modifient l'intensité du premier régime de dissipation, le Tableau 11 et Figure 112(c,d) montrent que la pente associée au premier régime demeure proche de 2,4 , soulignant une faible sensibilité de la pente à ces variations dans la plage explorée. En revanche, la pente du second régime apparaît davantage influencée par les variations conjointes de ces deux paramètres.

			Pente moyenne	
$T^0(MPa)$	C_2 [× 10^6 MPa]	D_2 [× 10^6]	Primaire (50-60 MPa)	Secondaire (75-90 MPa)
10	3	0,1	2,43	10,12
10	30	1,0	2,43	17,70
10	300	10,0	2,48	19,83

Tableau 11. Évolution de la pente pour le régime primaire et le régime secondaire pour des valeurs de $C_2 \in \{3, 30, 300\} \times 10^6$ MPa et $D_2 \in \{0,1, 1, 10\} \times 10^6$ MPa

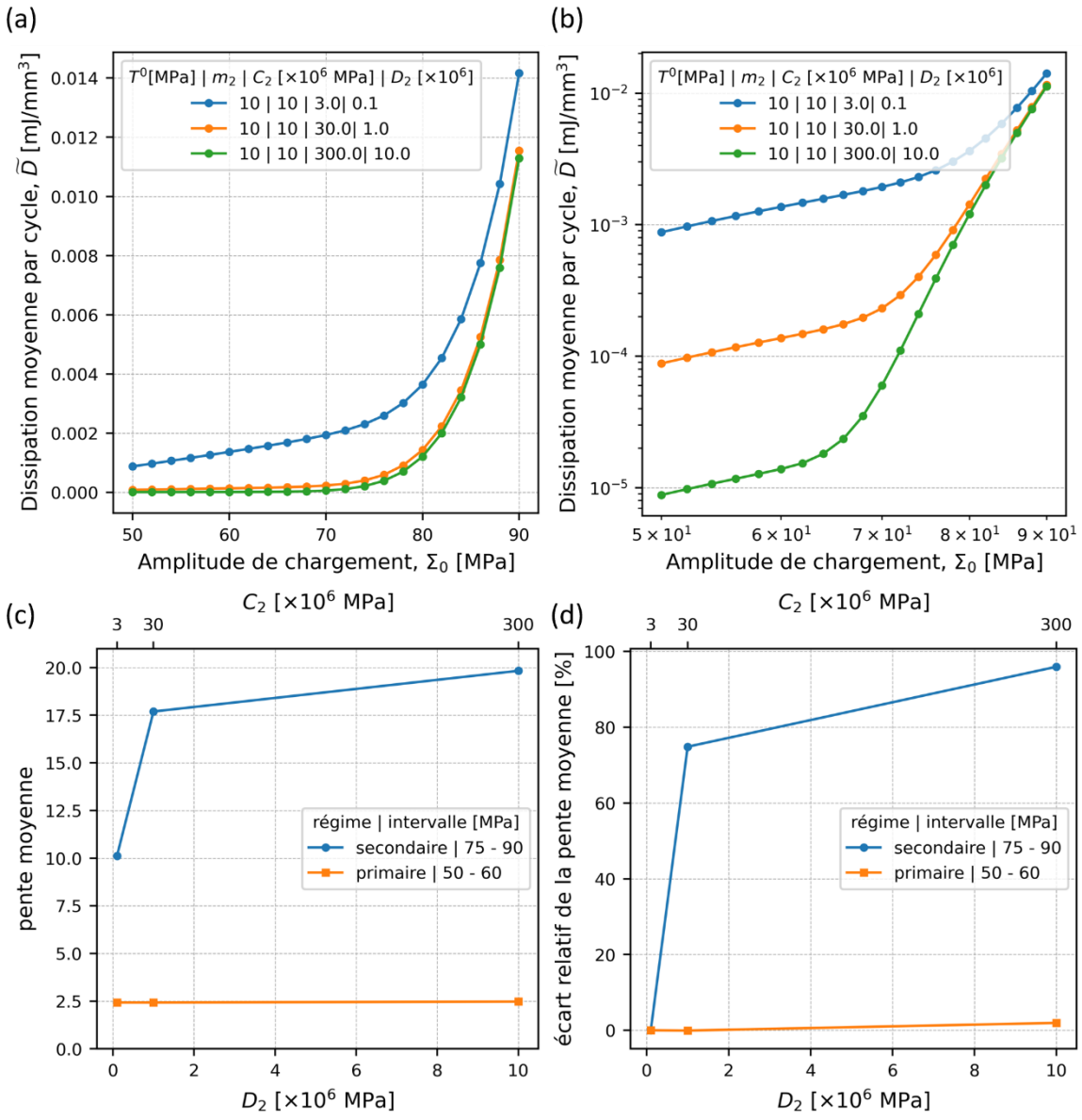


Figure 112. (a) Évolution de la dissipation moyenne par cycle pour la loi de comportement de Méric-Cailletaud avec un écrouissage du type Ohno-Wang (OW) pour des valeurs de $C_2 \in \{3, 30, 300\} \times 10^6$MPa et $D_2 \in \{0{,}1, 1, 10\} \times 10^6$MPa (a) échelle linéaire et (b) échelle logarithmique (c) variation de la pente pour les régimes primaire et secondaire

Pour conclure, cette section a été consacrée à l'analyse de l'influence des paramètres de la loi de comportement de type Ohno–Wang, afin de mieux comprendre leur rôle dans l'évolution de la contrainte nominale et de la dissipation moyenne par cycle. À partir d'un jeu de paramètres de référence, une étude de sensibilité a été menée, permettant de dégager plusieurs résultats notables.

Tout d'abord, l'influence du paramètre m_2 a été étudiée pour une plage de valeurs comprise entre 0 et 100. Il apparaît que m_2 exerce une faible influence sur la courbe contrainte–déformation nominale. En revanche, l'analyse de la contrainte en fonction de la déformation plastique montre qu'à partir de $m_2 = 10$, une rapide saturation de la contrainte est clairement observée. Par ailleurs, ce paramètre a une influence négligeable sur la pente

du second régime des courbes d'auto-échauffement, mais joue un rôle significatif sur la pente du premier régime.

Ensuite, l'effet de la diminution du paramètre C_2 et de l'augmentation du paramètre T^0, en maintenant D_2 constant de sorte de vérifier à chaque configuration que $\tau^0 = 40 = T^0 + C_2/D_2$, a été analysé. Cette variation montre également une faible influence sur la courbe contrainte–déformation nominale. En revanche, l'étude de la contrainte en fonction de la déformation plastique met en évidence que, pour des valeurs plus élevées de T^0, l'activation de la plasticité intervient plus tard. Concernant la dissipation moyenne par cycle, ce couple de paramètres exerce une influence non négligeable sur l'évolution du premier régime. Ce résultat souligne que le choix de ces paramètres doit être réalisé avec soin, certaines combinaisons pouvant conduire soit à l'absence de régime primaire, soit à un régime primaire présentant des pentes incompatibles avec les observations expérimentales.

Enfin, l'augmentation conjointe des paramètres C_2 et D_2, en maintenant leur ratio constant à 30 MPa et en fixant $T^0 = 10\ MPa$, montre également une faible influence sur la courbe contrainte – déformation nominale. L'analyse de la contrainte en fonction de la déformation plastique indique toutefois que l'augmentation simultanée de ces deux paramètres entraîne une diminution de la déformation plastique. En ce qui concerne les courbes de dissipation, une influence marquée sur l'intensité du premier régime est observée, tandis que la pente de premier régime demeure inchangée. Cependant, la pente du second régime est significativement influencée par ces variations.

La version de l'agrégat polycristallin proposée dans ce dernier chapitre est donc apte à reproduire les courbes d'auto-échauffement classiquement obtenu dans la littérature. Elle peut dès lors être utilisée pour étudier l'influence de différents facteurs sur ces courbes. Parmi les plus connus figure l'effet d'un état initial non vierge (Louge, 2019; Munier, 2012), qui fera l'objet des deux sections suivantes.

5.4. Influence d'un état initial non-vierge

5.4.1. Évolution de la contrainte nominale

Dans cette partie, l'influence d'un état initial non-vierge du matériau est explorée. Pour cela, l'agrégat polycristallin avec la loi de comportement considéré dans ce chapitre est d'abord soumis à un chargement préalable supérieur à la limite d'élasticité macroscopique puis ramené à un état de déformation et de contrainte macroscopiques nulles. Cette procédure permet d'évaluer l'influence d'un état initial non-vierge dans la mesure où ils subsistent à l'issue de ce chargement initial des contraintes résiduelles dans l'agrégat.

La Figure 113(a) présente en bleu le chargement préalable appliqué pour obtenir, à la fin du premier cycle, un état macroscopique sans déformation ni contrainte. Puis, le chargement cyclique de traction-compression est réalisé, avec un rapport de charge, R = -1,

une amplitude de contrainte, Σ_0 = 90 MPa et pour 20 cycles (le choix de ce nombre sera justifié ultérieurement). La Figure 113(b) illustre les boucles d'hystérésis contrainte – déformation correspondant à ce chargement. Aux instants où la contrainte atteint ses valeurs maximales et minimales, des pauses d'une durée Δt =1 s sont appliquées afin d'accélérer la stabilisation. En effet, de par le formalisme de la loi de comportement choisi, à savoir élasto-visco-plastique (même si les paramètres ont été choisis de sorte à ce que le caractère visqueux soit négligeable), dans cette nouvelle configuration la stabilisation peut prendre plusieurs dizaines/centaines de cycles. Dans la mesure où le caractère visqueux a été introduit pour des facilités d'intégration numérique et non pour représenter un quelconque phénomène physique, c'est bien le cycle stabilisé qui est recherché dans cette étude afin de mettre en évidence un potentiel effet des contraintes résiduelles au sein de l'agrégat.

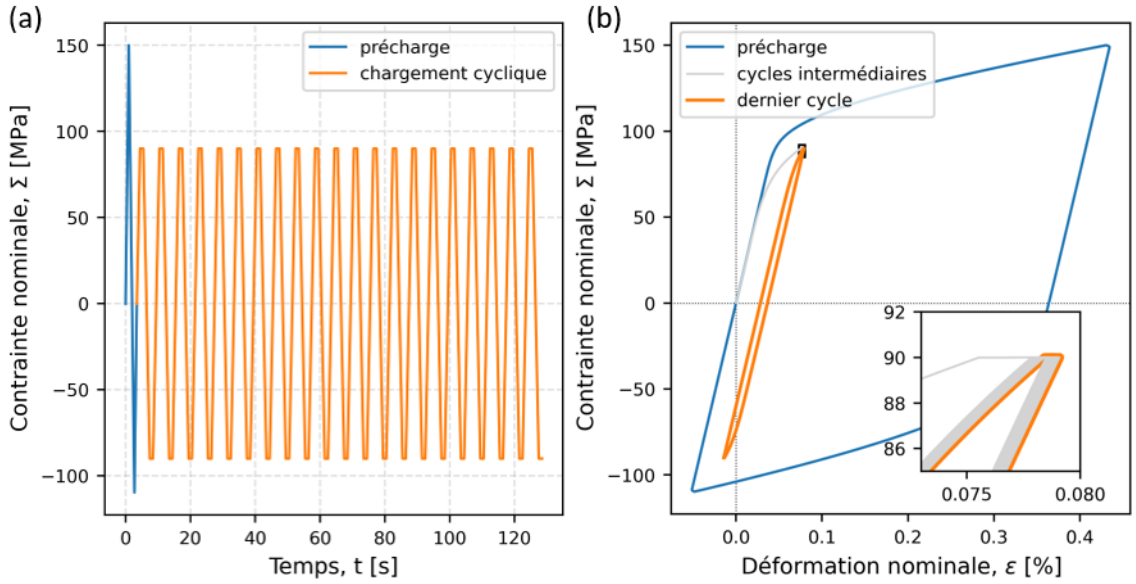


Figure 113. Contrainte nominale en fonction du temps (a) et boucles d'hystérésis contrainte – déformation (b) pour la précharge (bleu) et le chargement cyclique (orange). Dans (a), 20 cycles sont représentés ; dans (b), les cycles intermédiaires apparaissent en gris et le dernier cycle en orange. Les amplitudes de contrainte sont de 150 MPa pour la précharge et de 90 MPa pour le chargement.

5.4.2. Évolution de la dissipation moyenne par cycle

Après la description de la nature du chargement et l'étude de la réponse macroscopique, cette sous-section s'intéresse à l'évolution de la dissipation moyenne par cycle. La Figure 114(a,b) compare les dissipations obtenues avec et sans chargement préalable appliqué. L'influence d'une charge préalable apparaît donc très modérée et se manifeste principalement sur l'intensité de la dissipation : le cas préchargé présente des valeurs légèrement plus élevées. En revanche, les pentes associées aux régimes primaire et secondaire demeurent inchangées.

Sur la Figure 114(c), l'erreur relative entre la dissipation moyenne par cycle pour le 19ème et le 20ème cycles sont affichés. Pour des amplitudes comprises entre 50 et 66 MPa, l'écart augmente légèrement, de 0,03 % à 0,05 %. À partir de 66 MPa, une décroissance

progressive est observée, menant à des valeurs inférieures à 0,01 % à 90 MPa. Ces écarts relatifs très faibles confirment une stabilisation satisfaisante de la dissipation moyenne, ce qui justifie le choix du 20ème cycle comme cycle stabilisé dans la suite des simulations.

La sous-section suivante s'attachera à analyser l'influence du temps de pause.

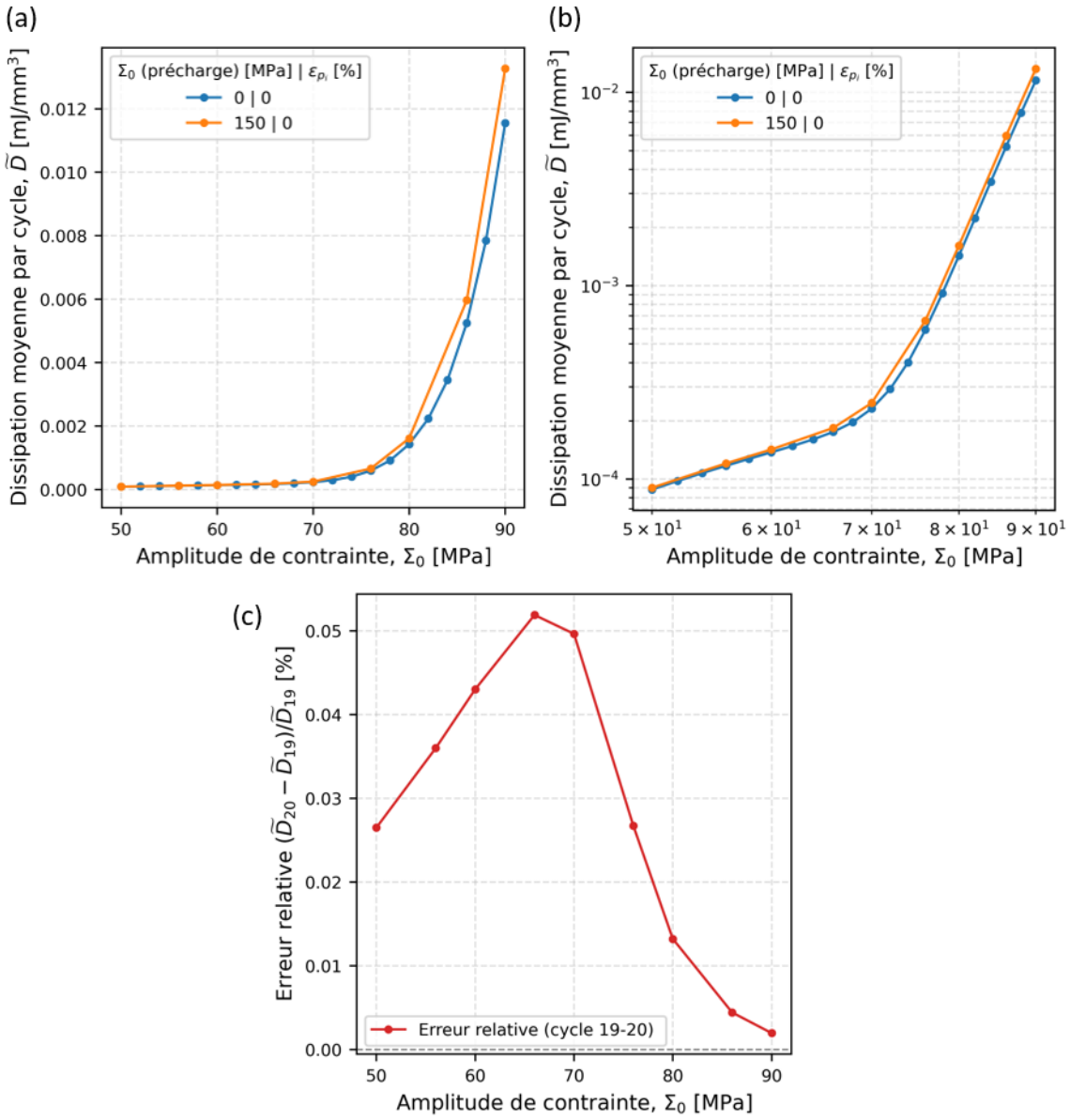


Figure 114. (a) Comparaison de la dissipation moyenne par cycle pour un VER de 625 grains, représentée en échelle linéaire(a) et en échelle logarithmique (b), pour la loi d'écrouissage de type Ohno–Wang à partir d'un état vierge et d'un état préchargé à 150 MPa (évalué au 20ème cycle). (c) Évolution de l'erreur relative entre les cycles 19 et 20 pour un tirage d'orientation.

5.4.3. Influence du temps de pause sur la dissipation moyenne par cycle

La Figure 115(a) montre l'évolution de la dissipation moyenne par cycle pour différents temps de pause en fonction du nombre de cycles pour une amplitude de contrainte de 60 MPa. Il apparaît clairement que l'introduction d'un temps de pause accélère la stabilisation

des cycles. Il est observé que l'influence du temps de pause demeure faible pour des durées comprises entre 1 et 10 s, justifiant ainsi le choix effectué dans ce travail.

Sur la Figure 115(b), l'évolution de la dissipation est calculée pour une amplitude de contrainte de 90 MPa. Il est notable que pour cette amplitude, moins de cycles pour arriver au cycle stabilisé sont nécessaires. En outre sur la Figure la Figure 115(a), cette évolution est analysée pour 80 cycles, un comportement presque constant est visualisé à partir du 20ème cycle. Ainsi le nombre de cycles choisie a été pris égale à 20.

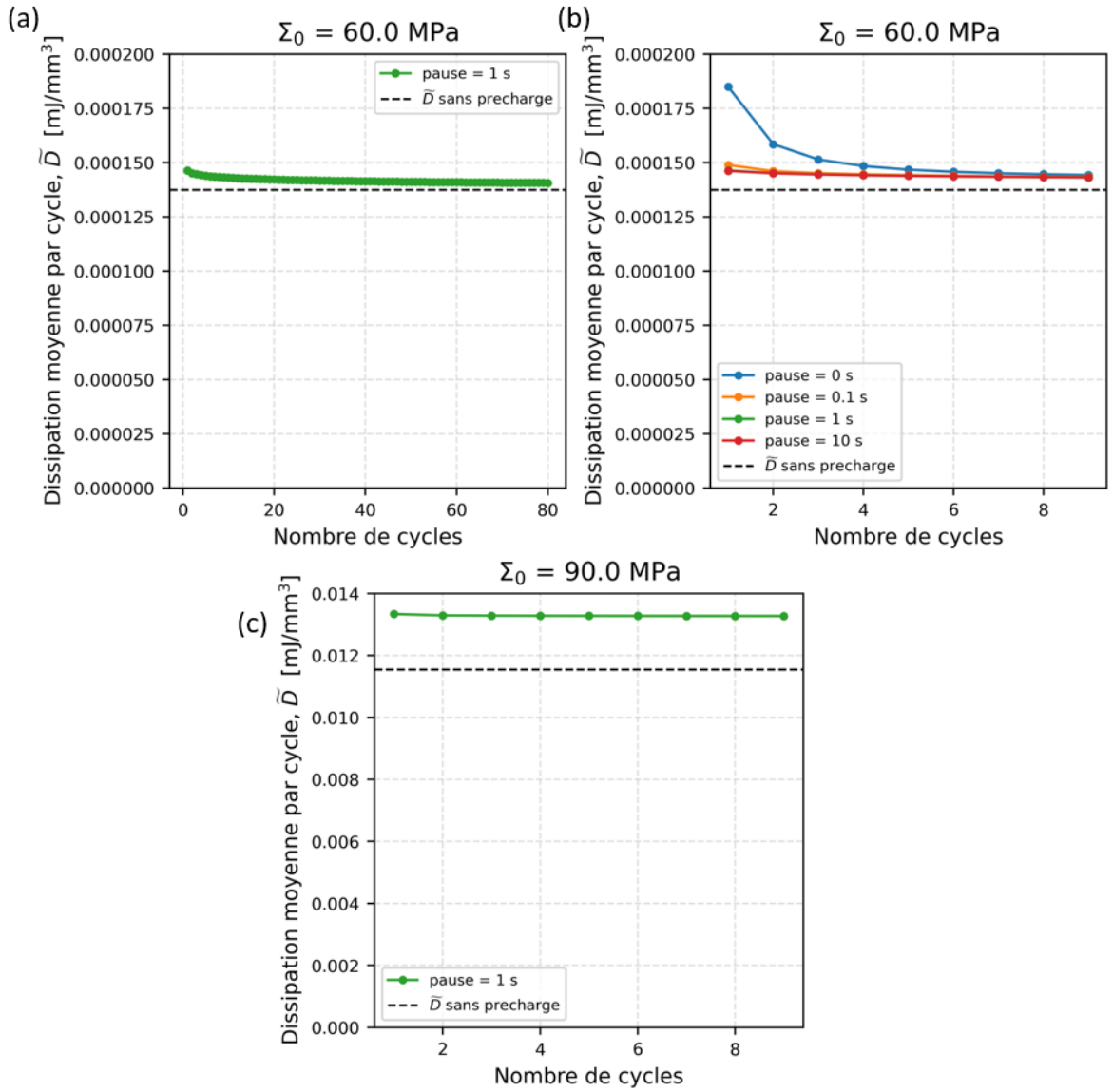


Figure 115. Évolution de la dissipation moyenne par cycle pour une amplitude de contrainte de (a) 60 MPa, pour des temps de pause compris entre 0 s et 10 s, (b) de 90 MPa avec un temps de pause de 1 s et (c) de 60 MPa avec un temps de pause de 1 s. La courbe en pointillés noirs représente la dissipation moyenne par cycle obtenue sans précharge (état vierge) à la fin du 1ère cycle.

5.5. Influence d'une pré-déformation plastique

Dans cette partie, contrairement à la partie précédente, un état de pré-déformation plastique macroscopique est maintenu à l'issue de la précharge. La Figure 116 illustre le chargement appliqué à l'agrégat (précharge + chargement cyclique) ainsi que la réponse macroscopique pour une précharge de 150 MPa (Figure 116(a,b)) et de 200 MPa (Figure 116 (c,d)). Dans ces configurations, le chargement cycliques est appliqué à partir d'un niveau de déformation plastique initiale respectivement de $\varepsilon_{p_i} = 0{,}36\%$ et $\varepsilon_{p_i} = 0{,}87\%$. L'objectif est d'évaluer l'influence de cette pré-déformation plastique initiale vis-à-vis des courbes d'auto-échauffement. En effet il a été montré dans la littérature (Louge, 2019) que cela influençait de manière non négligeable le résultat (Figure 117).

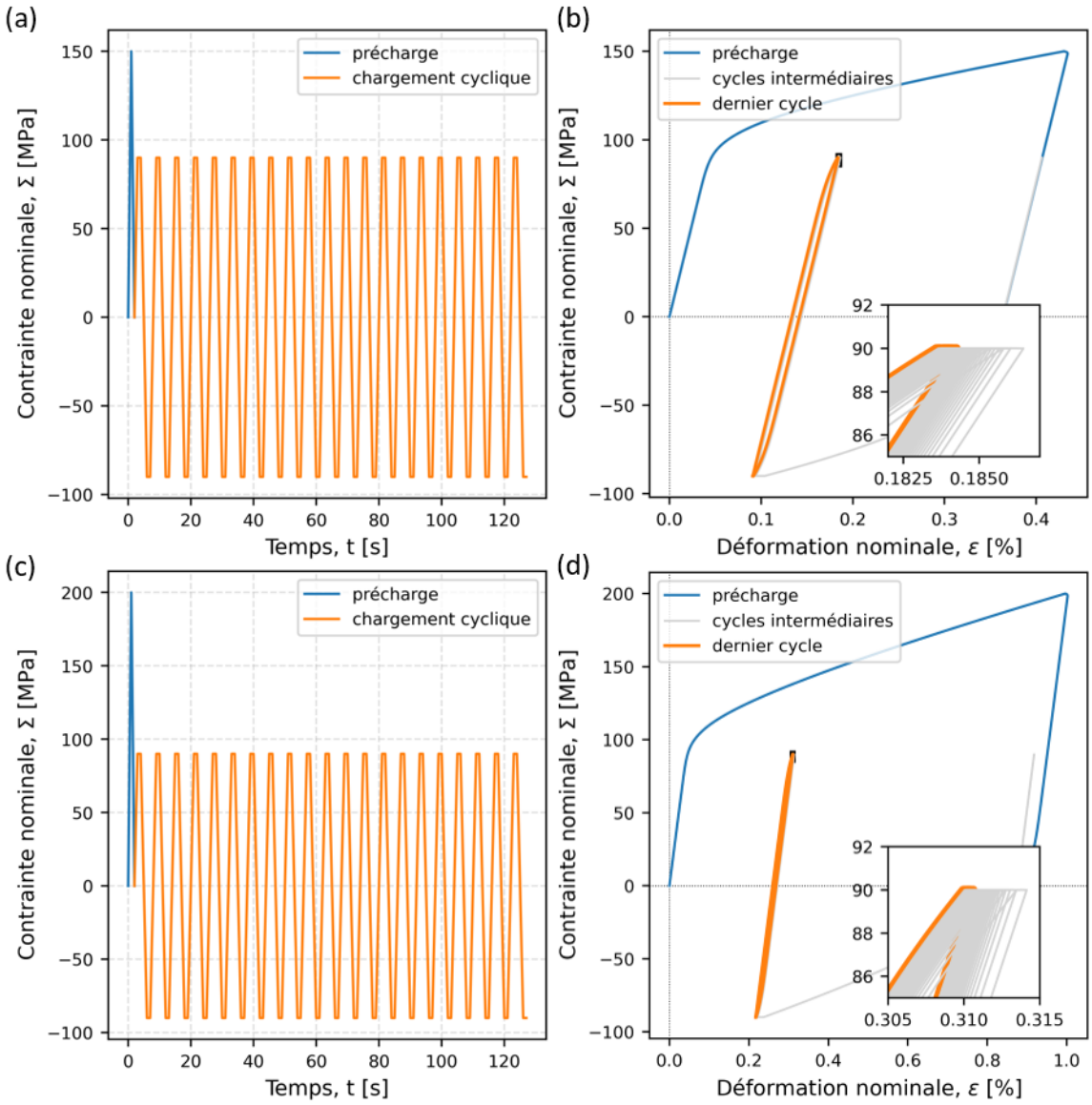
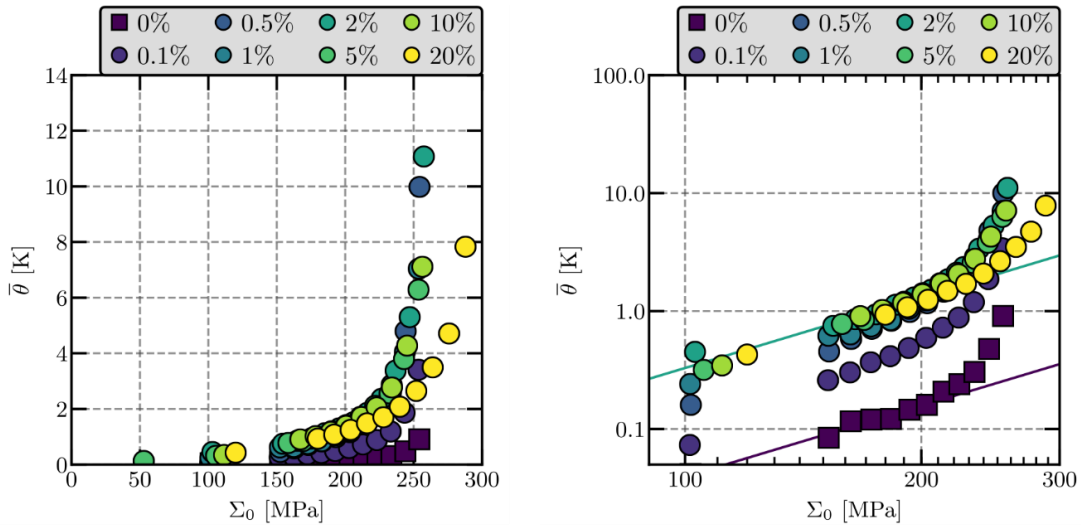


Figure 116. Contrainte nominale en fonction du temps (a-c) et courbe contrainte–déformation (b-d) (précharge en bleu (de 150 MPa avec $\varepsilon_{p_i} = 0{,}36\ \%$ pour (a-b) et de 200 MPa avec $\varepsilon_{p_i} = 0{,}87\ \%$ pour (c-d)) et chargement cyclique d'amplitude de 90 MPa en orange sauf dans (b-d) où les cycles intermédiaires apparaissent en gris et le dernier cycle en orange)



(a) *Échelle linéaire* **(b)** *Échelle logarithmique*

Figure 117. Effet d'une pré-déformation plastique sur les courbes d'auto-échauffement (Louge, 2019)

La Figure 118(a,b) montre une comparaison entre l'évolution de la dissipation moyenne par cycle pour le cas vierge (sans chargement au préalable et donc $\varepsilon_{p_i} = 0$) et le cas avec une déformation plastique initiale de $\varepsilon_{p_i} = 0{,}36\%$ et de $\varepsilon_{p_i} = 0{,}87\%$. Sur la Figure 118(c), l'évolution de l'écart relative est tracée. L'augmentation de la précharge provoque une augmentation de cet écart, tout en restant faible, de l'ordre de 0,6% à 50 MPa pour $\varepsilon_{p_i} = 0{,}87\%$.

La présence de cette déformation résiduelle induit donc une élévation de l'intensité de la dissipation. Par contre, l'évolution des pentes du régime primaire et du régime secondaire, illustrée sur la Figure 118(d), reste faible.

		Pente moyenne	
Σ_0 $(précharge)$ [MPa]	ε_{p_i} [%]	Primaire (50-60 MPa)	Secondaire (75-90 MPa)
0	0	2,43	17,70
150	0,36	2,29	17,44
200	0,87	1,63	17,14

Tableau 12. Évolution de la pente pour le régime primaire et le régime secondaire pour les valeurs de $\varepsilon_{p_i} \in \{0, 0{,}36, 0{,}87\}$

Cette observation est donc qualitativement en accord avec les résultats trouvés dans la littérature (Figure 117), mais d'intensité moindre. L'obtention de résultats plus en accord quantitativement nécessiterait sûrement l'ajout de variable(s) d'écrouissage isotrope, ce qui n'a pas pu être exploré dans le cadre de ce travail.

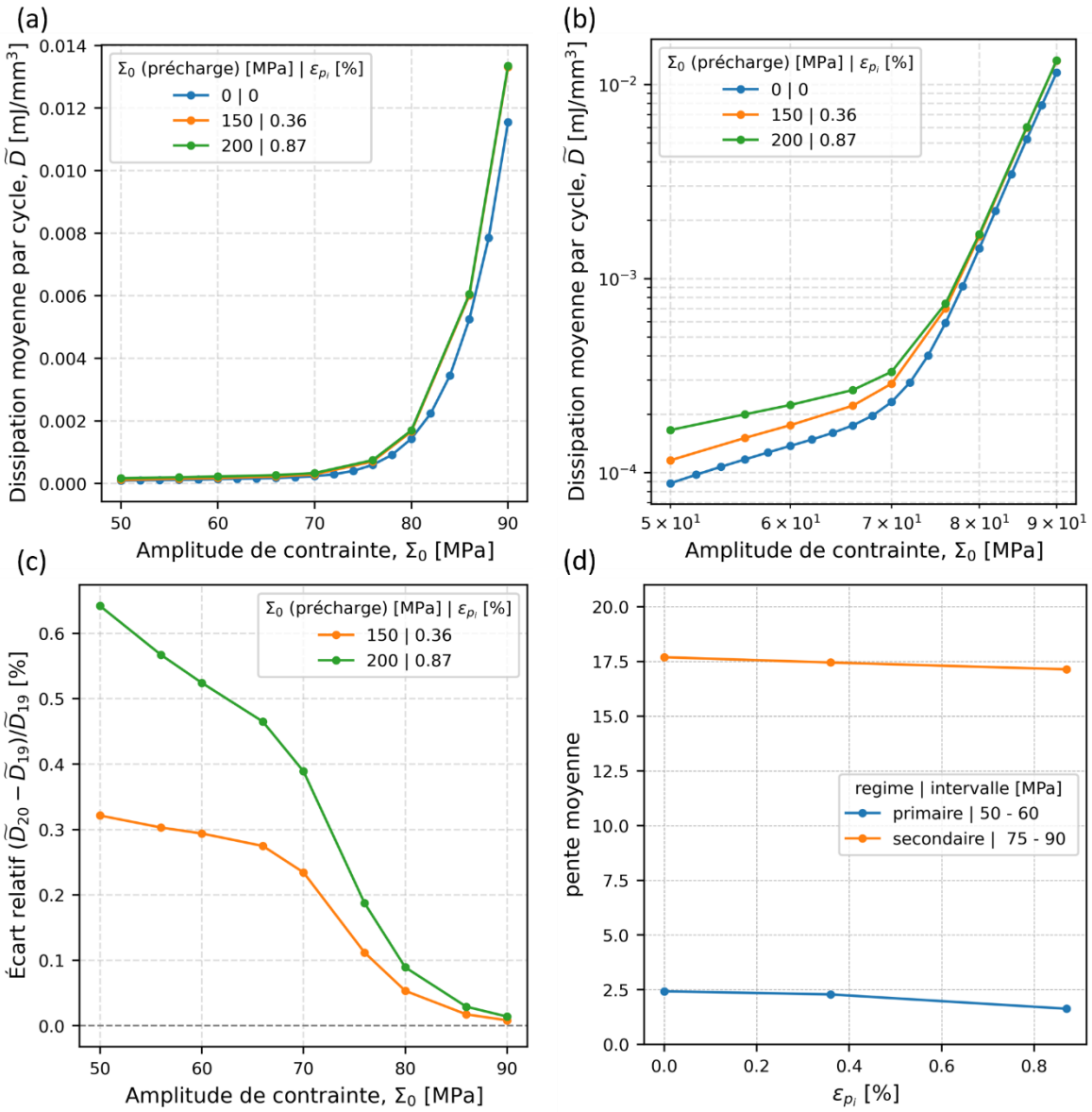


Figure 118. (a) Comparaison de la dissipation moyenne par cycle pour un VER de 625 grains, représentée en échelle linéaire(a) et échelle logarithmique (b), pour la loi d'écrouissage du type Ohno–Wang à partir d'un état vierge et d'un état préchargé à 150 MPa et 200 MPa (évalués au 20ème cycle). (c) Évolution de l'erreur relative entre les cycles 19 et 20 pour un tirage d'orientation et précharge avec $\varepsilon_{p_i} = 0{,}36\ \%$ et $\varepsilon_{p_i} = 0{,}87\ \%$.(d) Évolution de la pente du régime primaire et secondaire en fonction de ε_{p_i}.

5.6. Conclusion

Dans cette étude, il a été proposé de complexifier le modèle de comportement considéré afin de rendre compte de la présence du premier régime dans la courbe d'auto-échauffement. Pour cela, l'ajout d'un écrouissage cinématique non linéaire de type Ohno–Wang a été proposée.

L'application de cette nouvelle loi a permis de mettre en évidence l'apparition d'un régime primaire d'auto-échauffement, phénomène qui n'avait pas été observé avec la loi utilisée dans le chapitre précédent, où un unique écrouissage cinématique linéaire (Prager,

1956) avait été considéré. L'étude de la sensibilité des paramètres du nouvel écrouissage cinématique introduit a conduit aux observations suivantes :

- La variation de l'exposant m_2 entraîne principalement une variation de la pente du régime primaire de la courbe d'auto-échauffement ;
- La variation conjointe du couple T^0 et du rapport C_2/D_2 influence à la fois l'intensité du premier régime et la pente associée ;
- Enfin, la modification des valeurs absolues de C_2 et D_2, tout en maintenant leur rapport constant, modifie l'intensité du premier régime sans modifier la pente correspondante.

Ce résultat a été obtenu en gardant une description du régime secondaire identique à celle obtenue dans le chapitre précédent. Ainsi l'approche proposée permet, d'une part, de décrire la courbe d'auto-échauffement de nombreux matériaux métalliques (c'est-à-dire, ceux présentant deux régimes d'auto-échauffement), et d'autre part, est en accord avec les observations des mécanismes réalisées dans la littérature. Elle ouvre ainsi la voie à une meilleure compréhension des mécanismes dissipatifs au sein des matériaux et peut être désormais un formidable outil d'analyse de facteurs d'influence sur ces mécanismes.

Conclusions et perspectives

Conclusions

Dans le présent manuscrit, une étude a été menée dans le domaine de la plasticité cristalline au service de l'analyse de l'auto-échauffement des matériaux métalliques soumis à des chargements cycliques de faible amplitude, ainsi que de son lien avec la tenue en fatigue polycyclique.

Comme présenté au chapitre 1, l'étude de la fatigue des matériaux constitue un enjeu majeur en ingénierie mécanique. Dans ce contexte, la méthode de l'auto-échauffement (AE) s'est imposée comme une technique de caractérisation rapide et pertinente, en alternative à certains essais de fatigue classiques, plus longs et coûteux. La modélisation de l'auto-échauffement repose sur l'équation de la chaleur et s'appuie sur la compréhension des mécanismes dissipatifs à l'échelle microscopique. À cette fin, le modèle probabiliste à deux échelles fondé sur le Processus Ponctuel de Poisson (P.P.P.) a été introduit. Ce modèle considère un volume élémentaire représentatif (VER) constitué de sites élasto-plastiques distribués aléatoirement dans une matrice. Les observations expérimentales ont par ailleurs mis en évidence deux régimes distincts à faibles amplitudes de chargement : un régime primaire, caractérisé par une microplasticité diffuse associée à la désorientation locale des dislocations, et un régime secondaire, marqué en surface par l'apparition de bandes de glissement persistantes pour des amplitudes restant inférieurs à la limite élastique macroscopique. Lorsque l'hypothèse du maillon le plus faible est combinée au P.P.P., la tenue à la fatigue est alors décrite par une loi de Weibull. Cela permet, par conséquent, de relier les courbes d'auto-échauffement à la dispersion en fatigue.

Cependant, il a été montré que la microstructure joue un rôle déterminant dans la durée de vie en fatigue des matériaux. L'analyse de cet effet a motivé un changement d'échelle, en s'appuyant sur des simulations numériques de plasticité cristalline appliquées à des agrégats polycristallins. Plusieurs objectifs ont ainsi été définis à l'issue du chapitre 1 : l'étude de la dissipation intrinsèque d'un point de vue qualitatif et quantitatif, l'analyse critique des hypothèses du P.P.P., l'interprétation physique de la notion de site d'activation plastique, ainsi que l'établissement d'un lien entre le modèle probabiliste à deux échelles et le comportement du polycristal, notamment au regard de l'hypothèse du maillon le plus faible et de la notion de limites d'endurance.

Le chapitre 2 a permis de poser les bases de cette analyse en présentant l'agrégat polycristallin étudié et en évaluant l'influence de plusieurs paramètres numériques et microstructuraux, tels que le nombre de grains, le nombre de tirages d'orientations

cristallographiques et les conditions aux limites. L'agrégat polycristallin a été généré à l'aide du logiciel Neper, tandis que le comportement mécanique a été modélisé par une loi de plasticité cristalline de type Méric–Cailletaud, associée à un écrouissage cinématique linéaire de type Prager. Les simulations ont été réalisées dans le cadre d'une approche d'homogénéisation numérique basée sur la transformée de Fourier rapide (FFT). À l'issue de ce chapitre, un cas d'étude de référence a été retenu, composé de 625 grains et de 30 tirages des orientations. Il a été montré que, si l'influence du tirage des orientations est faible sur la réponse macroscopique et sur les courbes d'auto-échauffement, elle devient significative lorsqu'une analyse locale est menée. La contrainte maximale étudiée a été fixée à 90 MPa, valeur inférieure à la limite élastique macroscopique ($R_{p_{0.2}}$).

Le chapitre 3 a porté sur l'analyse détaillée de la dissipation moyenne par cycle pour différentes amplitudes de chargement, ainsi que sur l'étude de l'apparition progressive de la microplasticité. Un résultat encourageant a été obtenu : l'évolution de la dissipation moyenne par cycle présente des ordres de grandeur et des tendances comparables à celles du régime secondaire des courbes d'auto-échauffement expérimentales. Néanmoins, une légère courbure en échelle logarithmique a été observée, traduisant une variation de la pente. Une analyse plus fine de la microplasticité à l'échelle du voxel et du grain a montré que ces entités ne peuvent pas être directement assimilées aux sites du P.P.P., les lois de puissance associées à leur activation ne coïncidant pas avec celles issues de la dissipation au sens du modèle. L'influence de facteurs de premier ordre, tels que les tenseurs d'élasticité, a également été mise en évidence, tandis que les paramètres de l'écrouissage cinématique linéaire se sont révélés peu influents sur la pente des courbes de dissipation. Enfin, des chargements multiaxiaux ont été étudiés à partir de surfaces d'iso-dissipation, ouvrant des perspectives pour l'analyse de la fatigue multiaxiale.

Une première approche de la fatigue a également été menée à partir d'indicateurs de fatigue (FIP) basés sur le glissement plastique cumulé. Bien que l'approche par voxel montre un possible dialogue avec les courbes d'auto-échauffement, les valeurs obtenues restent supérieures à celles rapportées dans la littérature. Cette limitation a conduit à proposer, au chapitre 4, l'introduction d'une échelle intermédiaire.

Cette échelle intermédiaire correspond à celle des lamelles, introduites afin de mieux représenter l'échelle de localisation des déformations plastiques propres au régime secondaire de l'auto-échauffement. À chaque lamelle est associée une contrainte de cisaillement résolue critique variable. L'évolution de la dissipation moyenne par cycle s'est révélée peu modifiée par rapport au cas sans lamelles, bien qu'une augmentation notable des intensités locales ait été observée. L'analyse de l'activation des lamelles a permis d'établir, à faibles amplitudes, un lien plus cohérent entre le P.P.P., les courbes d'auto-échauffement et la fatigue. Toutefois, ces approches ne permettent pas, à elle seule, de faire apparaître un régime primaire.

Afin de modéliser ce régime primaire, observé expérimentalement dans de nombreux alliages métalliques, le chapitre 5 a proposé de complexifier la loi de comportement par l'introduction d'un écrouissage cinématique non linéaire de type Ohno–Wang. Cette modification a permis d'obtenir des résultats très satisfaisants, avec des pentes du régime primaire proches de celles mesurées expérimentalement. L'étude de sensibilité menée sur les paramètres de cette loi a montré une faible influence sur la réponse macroscopique, mais une influence marquée sur l'intensité et la pente de la dissipation moyenne par cycle associée au régime primaire. L'effet d'un chargement préalable a également été analysé, avec des résultats qualitativement en accord avec la littérature.

En conclusion, ce travail a proposé une analyse originale et inédite de l'auto-échauffement à partir de simulations de plasticité cristalline. Il contribue à une meilleure compréhension des mécanismes dissipatifs et à l'interprétation plus fine des modèles probabilistes utilisés à l'échelle expérimentale. En résumé, les principaux apports de ce travail sont les suivants :

- Une modélisation en plasticité cristalline capable de reproduire les deux régimes classiques de l'auto-échauffement observés expérimentalement ;
- Le premier régime de l'auto-échauffement est obtenu grâce à l'introduction d'un écrouissage non-linéaire de type Ohno-Wang, en cohérence avec caractère diffus observé expérimentalement ;
- Le second régime est associé à la localisation de fortes déformations plastiques dans un nombre limité de lamelles, réparties aléatoirement dans l'espace en accord avec les observations expérimentales. L'activation de ces lamelles dépend principalement de l'orientation du grain dans lequel elle se situent, de l'amplitude du chargement et des effets de voisinage, et peut être modélisée par une loi en puissance de l'amplitude du chargement ;
- Un lien avec la fatigue est retrouvé lorsque le modèle intégrant les lamelles est considéré. Les hypothèses du modèle probabiliste à deux échelles sont ainsi validées en établissant une correspondance entre les lamelles et les sites d'activation.

Comme tout travail de recherche, il ouvre plusieurs perspectives.

Perspectives

Les simulations ont été menées sur des agrégats polycristallins, et de nombreux facteurs ont été analysés, susceptibles d'influencer l'allure du régime primaire et du régime secondaire. Il est notable, dans la littérature, que certains alliages métalliques polycristallins d'aluminium et monocristaux de Ni (Mion et al., 2025) possèdent un seul régime. Les simulations de plasticité cristalline développées dans ce travail peuvent ainsi apporter des éléments d'interprétation concernant l'absence de deux régimes. En particulier, comme montré au chapitre 3, l'anisotropie élastique apparaît comme un facteur de premier ordre influençant significativement la forme des courbes d'auto-échauffement. De même, l'étude

de sensibilité menée au chapitre 5 sur les paramètres de la loi de comportement de type Ohno–Wang montre que certains jeux de paramètres peuvent affecter l'intensité et la pente des régimes en échelle logarithmique.

Une autre perspective concerne la modélisation de l'auto-échauffement à partir de la densité de sites actifs. Dans ce travail, cette densité est définie de manière à suivre une loi en puissance de l'amplitude des contraintes. Une piste d'amélioration consisterait à modifier le processus d'activation, par exemple en rendant le paramètre d'échelle S_0 de la loi de Weibull dépendant de la déformation plastique, afin de prendre en compte les effets d'histoire (Louge, 2019). Une telle évolution permettrait de mieux modéliser les résultats obtenus en présence de pré-déformation plastique au chapitre 5, et plus généralement d'affiner la description de l'activation du glissement plastique. Par ailleurs, la présence d'une courbure dans l'évolution de la microplasticité et de la dissipation, observée aux chapitres 2 et 3, interroge sur le rôle des incompatibilités intergranulaires et intragranulaires ; une modification de la loi d'activation des sites pourrait contribuer à une modélisation plus réaliste de ces effets. Dans le même esprit, la complexification de la loi de comportement par l'introduction d'un écrouissage isotrope constituerait une autre voie prometteuse pour mieux prendre en compte les effets d'histoire. L'étude de l'influence de la contrainte moyenne représente également une perspective importante, nécessitant là encore une évolution de la loi de comportement.

Les effets de surface constituent un autre point clé. Comme montré à la fin du chapitre 2, des différences notables apparaissent entre surfaces libres et conditions périodiques, notamment en termes de localisation du glissement plastique. Il apparaît désormais nécessaire de mener des études plus approfondies afin d'évaluer l'impact de ces effets sur la fatigue à l'aide du formalisme introduit au chapitre 3 et 4.

Des premiers résultats encourageants concernant les chargements multiaxiaux ont été obtenus au chapitre 3. Une exploration plus approfondie de ces iso-surfaces d'auto-échauffement, en lien avec la fatigue, reste à mener. Cela implique de poursuivre le dialogue entre mesures expérimentales, à l'image des travaux de Guellec (Guellec, 2023), et simulations numériques, dans la continuité des développements proposés dans ce manuscrit.

Un autre aspect important concerne la validation expérimentale des simulations de plasticité cristalline. Bien que les simulations réalisées sur le Fe-α aient permis de reproduire les résultats d'auto-échauffement de manière qualitative et quantitative satisfaisante, l'étude développée dans ce manuscrit constitue avant tout une première étape. Le matériau considéré est volontairement simple, afin de permettre une investigation approfondie des différents mécanismes et paramètres influençant l'auto-échauffement et la microplasticité, et d'en clarifier les effets respectifs. Dans cette perspective, il apparaît désormais essentiel de confronter plus directement les simulations aux essais expérimentaux. Cette étape est d'autant plus importante que l'étude de la fatigue, via les courbes S–N–P, ne peut être pleinement menée dans le cadre du présent travail, faute de données expérimentales de fatigue disponibles pour le matériau virtuel considéré. La réalisation d'une campagne expérimentale dédiée constituerait ainsi un levier majeur pour renforcer la portée et la

validité de la démarche proposée. Une telle campagne permettrait d'identifier un jeu de paramètres reproduisant le comportement macroscopique observé (dissipation et comportement mécanique), en considérant une microstructure la plus fidèle possible au matériau. Cette microstructure réaliste serait obtenue soit sous forme issue de caractérisations expérimentales, soit sous forme de structures virtuelles représentatives (par exemple à partir d'une taille moyenne de grains donnée). Finalement, les étapes développées dans cette thèse fournissent déjà de nombreuses pistes, interprétations et résultats encourageants, ouvrant la voie à l'utilisation de la plasticité cristalline comme une véritable "machine virtuelle d'essais".

Bibliographie

A. Lebensohn, R. (2001). N-site modeling of a 3D viscoplastic polycrystal using Fast Fourier Transform. *Acta Materialia*, *49*(14), 2723-2737. https://doi.org/10.1016/S1359-6454(01)00172-0

Abaqus. (s. d.). Consulté 5 décembre 2023, à l'adresse https://www.3ds.com/products-services/simulia/products/abaqus/abaquscae/

Amini, B. (2021). Study of high cycle fatigue of metastable austenitic stainless steel at room and low temperatures via self-heating measurements [Thesis, École nationale d'ingénieurs de Brest]. In *Theses.fr*. https://theses.fr/2021ENIB0009

Armstrong, P. J., Frederick, C. O., & others. (1966). *A mathematical representation of the multiaxial Bauschinger effect* (Vol. 731). Berkeley Nuclear Laboratories Berkeley, CA.

Arsenlis, A., M. Parks, D., Becker, R., & V. Bulatov, V. (2004). On the evolution of crystallographic dislocation density in non-homogeneously deforming crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, *52*(6), 1213-1246. https://doi.org/10.1016/j.jmps.2003.12.007

Asaro, R. J. (1983). Crystal Plasticity. *Journal of Applied Mechanics*, *50*(4b), 921-934. https://doi.org/10.1115/1.3167205

Barbe, F. (2000). *Etude numérique de la plasticité d'agrégats polycristallins* [Phdthesis, École Nationale Supérieure des Mines de Paris]. https://pastel.hal.science/tel-00005640

Barbe, F., Decker, L., Jeulin, D., & Cailletaud, G. (2001). Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 1 : F.E. model. *International Journal of Plasticity*, *17*(4), 513-536. https://doi.org/10.1016/S0749-6419(00)00061-9

Bathias, C., & Paris, P. C. (2004). *Gigacycle Fatigue in Mechanical Practice*. CRC Press. https://doi.org/10.1201/9780203020609

Becker, R. (1991). Analysis of texture evolution in channel die compression—I. Effects of grain interaction. *Acta Metallurgica et Materialia*, *39*(6), 1211-1230. https://doi.org/10.1016/0956-7151(91)90209-J

Becker, R., Butler, J. F., Hu, H., & Lalli, L. A. (1991). Analysis of an aluminum single crystal with unstable initial orientation (001) [110] in channel die compression. *Metallurgical Transactions A*, *22*(1), 45-58. https://doi.org/10.1007/BF03350948

Bednarczyk, W., Wątroba, M., Jain, M., Mech, K., Bazarnik, P., Bała, P., Michler, J., & Wieczerzak, K. (2023). Determination of critical resolved shear stresses associated with <*a*> slips in pure Zn and Zn-Ag alloys via micro-pillar compression. *Materials & Design*, *229*, 111897. https://doi.org/10.1016/j.matdes.2023.111897

Bellis, C., & Suquet, P. (2019). Geometric Variational Principles for Computational Homogenization. *Journal of Elasticity*, *137*(2), 119-149. https://doi.org/10.1007/s10659-018-09713-9

Bercelli, L. (2021). *Étude des propriétés en fatigue polycyclique des matériaux et des structures obtenus par le procédé de fabrication additive arc-fil* [Phdthesis, ENSTA Bretagne - École nationale supérieure de techniques avancées Bretagne]. https://theses.hal.science/tel-03649347

Boeff, M., Hassan, H. ul, & Hartmaier, A. (2017). Micromechanical modeling of fatigue crack initiation in polycrystals. *Journal of Materials Research*, *32*(23), 4375-4386. https://doi.org/10.1557/jmr.2017.384

Boulanger, T. (2004). *Analyse par thermographie infrarouge des sources de chaleur induites par la fatigue des aciers* [Thesis, Montpellier 2]. https://theses.fr/2004MON20224

Boulanger, T., Chrysochoos, A., Mabru, C., & Galtier, A. (2004). Calorimetric analysis of dissipative and thermoelastic effects associated with the fatigue behavior of steels. *International Journal of Fatigue*, *26*(3), 221-229. https://doi.org/10.1016/S0142-1123(03)00171-3

Briffod, F., Shiraiwa, T., & Enoki, M. (2016). Fatigue Crack Initiation Simulation in Pure Iron Polycrystalline Aggregate. *Materials Transactions*, *57*(10), 1741-1746. https://doi.org/10.2320/matertrans.M2016216

Busso, E. P., & Cailletaud, G. (2005). On the selection of active slip systems in crystal plasticity. *International Journal of Plasticity*, *21*(11), 2212-2231. https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2005.03.019

Cailletaud, G. (1988). Une approche micromécanique du comportement des polycristaux. *Revue de Physique Appliquée*, *23*(4), 353. https://doi.org/10.1051/rphysap:01988002304035300

Cailletaud, G. (1992). A micromechanical approach to inelastic behaviour of metals. *International Journal of Plasticity*, *8*(1), 55-73. https://doi.org/10.1016/0749-6419(92)90038-E

Castelluccio, G. M., & McDowell, D. L. (2014). Mesoscale modeling of microstructurally small fatigue cracks in metallic polycrystals. *Materials Science and Engineering: A*, *598*, 34-55. https://doi.org/10.1016/j.msea.2014.01.015

Castelluccio, G. M., & McDowell, D. L. (2015). Microstructure and mesh sensitivities of mesoscale surrogate driving force measures for transgranular fatigue cracks in polycrystals. *Materials Science and Engineering: A*, *639*, 626-639. https://doi.org/10.1016/j.msea.2015.05.048

Catalbiano, T., Geraci, A., & Orlando, M. (1984). Analisi tramite infrarosso termico di provini sollecitati a fatica. *Il progettista industriale*, *12*, 88-99.

Cazaud, R. (1948). La fatigue des métaux. *Dunod*.

Chan, K. S. (2010). Roles of microstructure in fatigue crack initiation. *International Journal of Fatigue, Emerging Frontiers in Fatigue*, *32*(9), 1428-1447. https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2009.10.005

Charkaluk, E., Bignonnet, A., Constantinescu, A., & Dang Van, K. (2002). Fatigue design of structures under thermomechanical loadings. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, *25*(12), 1199-1206. https://doi.org/10.1046/j.1460-2695.2002.00612.x

Charpagne, M. A., Hestroffer, J. M., Polonsky, A. T., Echlin, M. P., Texier, D., Valle, V., Beyerlein, I. J., Pollock, T. M., & Stinville, J. C. (2021). Slip localization in Inconel 718 : A three-dimensional and statistical perspective. *Acta Materialia*, *215*, 117037. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.117037

Chen, J., Wang, Z., & Korsunsky, A. M. (2022). Multiscale stress and strain statistics in the deformation of polycrystalline alloys. *International Journal of Plasticity*, *152*, 103260. https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2022.103260

Chrysochoos, A., & Louche, H. (2000). An infrared image processing to analyse the calorific effects accompanying strain localisation. *International Journal of Engineering Science*, *38*(16), 1759-1788. https://doi.org/10.1016/S0020-7225(00)00002-1

Cruzado, A., Lucarini, S., LLorca, J., & Segurado, J. (2018). Crystal plasticity simulation of the effect of grain size on the fatigue behavior of polycrystalline Inconel 718. *International Journal of Fatigue*, *113*, 236-245. https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2018.04.018

Cugy, P., & Galtier, A. (2002). Microplasticity and temperature increase in low carbon steels. *Proceedings of the 7th int. fat. conf., Stockholm (Sweden)*.

De Finis, R., Palumbo, D., Ancona, F., & Galietti, U. (2015). Fatigue limit evaluation of various martensitic stainless steels with new robust thermographic data analysis. *International Journal of Fatigue*, *74*, 88-96. https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2014.12.010

de Almeida, O. Z., Carrere, N., Saux, M. L., Saux, V. L., Moreau, G., Pannier, Y., Castagnet, S., & Marco, Y. (2025). Compression-compression fatigue of quasi-isotropic laminates : Failure mechanisms and link between dissipative behavior and fatigue life. *International Journal of Fatigue*, *193*, 108780. https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2024.108780

Demilly, K., Cavoit, J., Marco, Y., Moreau, G., Dolo, G., & Carrere, N. (2024). Estimating fatigue life of carbon/epoxy composites : A rapid method coupling thermo-mechanical analysis and residual strength. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, *47*(6), 1856-1867. https://doi.org/10.1111/ffe.14254

Denoual, C., & Marquis, D. (1998). *Approche probabiliste du comportement à l'impact du carbure de silicium : Application aux blindages moyens*.

Dillon, O. W. (1963). Coupled thermoplasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, *11*(1), 21-33. https://doi.org/10.1016/0022-5096(63)90004-8

Doudard, C. (2004). *Détermination rapide des propriétés en fatigue à grand nombre de cycles à partir d'essais d'échauffement* [These de doctorat, Cachan, Ecole normale supérieure]. https://www.theses.fr/2004DENS0036

Doudard, C., Calloch, S., Cugy, P., Galtier, A., & Hild, F. (2005). A probabilistic two-scale model for high-cycle fatigue life predictions. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, *28*(3), 279-288. https://doi.org/10.1111/j.1460-2695.2005.00854.x

Dowling, N. E. (1971). *Fatigue Failure Predictions for Complicated Stress-Strain Histories* (TAM337). Art. TAM337. https://apps.dtic.mil/sti/html/tr/AD0736583/

Dowling, N. E., Kral, M. V., & Kampe, S. L. (2019). *Mechanical behavior of materials : Engineering methods for deformation, fracture, and fatigue* (Fifth Edition). Pearson.

Drugan, W. J., & Willis, J. R. (1996). A micromechanics-based nonlocal constitutive equation and estimates of representative volume element size for elastic composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, *44*(4), 497-524. https://doi.org/10.1016/0022-5096(96)00007-5

Dunne, F. P. E., Rugg, D., & Walker, A. (2007). Lengthscale-dependent, elastically anisotropic, physically-based hcp crystal plasticity : Application to cold-dwell fatigue in Ti alloys. *International Journal of Plasticity*, *23*(6), 1061-1083. https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2006.10.013

Durmaz, A. R., Natkowski, E., Arnaudov, N., Sonnweber-Ribic, P., Weihe, S., Münstermann, S., Eberl, C., & Gumbsch, P. (2022). Micromechanical fatigue experiments for validation of microstructure-sensitive fatigue simulation models. *International Journal of Fatigue*, *160*, 106824. https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2022.106824

Eisenlohr, P., Diehl, M., Lebensohn, R. A., & Roters, F. (2013). A spectral method solution to crystal elasto-viscoplasticity at finite strains. *International Journal of Plasticity, Microstructure-based Models of Plastic Deformation*, *46*, 37-53. https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2012.09.012

El-Awady, J. A., Wen, M., & Ghoniem, N. M. (2009). The role of the weakest-link mechanism in controlling the plasticity of micropillars. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, *57*(1), 32-50. https://doi.org/10.1016/j.jmps.2008.10.004

Eshelby, J. D. (1957). The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proceedings of the royal society of London. Series A. Mathematical and physical sciences*, *241*(1226), 376-396.

Esling, C., Bechler-Ferry, E., & Bunge, H. J. (1982). Three-Dimensional Texture Analysis After Bunge and Roe : Correspondence Between the Respective Mathematical Techniques. *Texture, Stress, and Microstructure*, *5*(2), 95-125. https://doi.org/10.1155/TSM.5.95

Evrard, P., Aubin, V., Degallaix, S., & Kondo, D. (2008). Formulation of a new single crystal law for modeling the cyclic softening. *Mechanics Research Communications*, *35*(8), 589-594. https://doi.org/10.1016/j.mechrescom.2008.06.001

Ezanno, A. (2011). *Caractérisation rapide des propriétés à la fatigue à grand nombre de cycles des matériaux de fonderie à partir d'essais d'auto-échauffement : Application aux alliages d'hélices marines* [Thesis, Brest]. https://theses.fr/2011BRES2028

Ezanno, A., Doudard, C., Calloch, S., & Heuzé, J.-L. (2013). A new approach to characterizing and modeling the high cycle fatigue properties of cast materials based on self-heating measurements under cyclic loadings. *International Journal of Fatigue*, *47*, 232-243. https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2012.09.005

Farooq, H., Cailletaud, G., Forest, S., & Ryckelynck, D. (2020). Crystal plasticity modeling of the cyclic behavior of polycrystalline aggregates under non-symmetric uniaxial loading :

Global and local analyses. *International Journal of Plasticity*, *126*, 102619. https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2019.10.007

Fatemi, A., & Socie, D. F. (1988). A Critical Plane Approach to Multiaxial Fatigue Damage Including Out-of-Phase Loading. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, *11*(3), 149-165. https://doi.org/10.1111/j.1460-2695.1988.tb01169.x

Feaugas, X., & Pilvin, P. (2009). A Polycrystalline Approach to the Cyclic Behaviour of f.c.c. Alloys – Intra-Granular Heterogeneity. *Advanced Engineering Materials*, *11*(9), 703-709. https://doi.org/10.1002/adem.200900039

Fleck, N. A., Muller, G. M., Ashby, M. F., & Hutchinson, J. W. (1994). Strain gradient plasticity : Theory and experiment. *Acta Metallurgica et Materialia*, *42*(2), 475-487. https://doi.org/10.1016/0956-7151(94)90502-9

Fontana, M. G. (1985). *Corrosion engineering*. https://www.osti.gov/biblio/5741236

Forest, S., & Rubin, M. B. (2016). A rate-independent crystal plasticity model with a smooth elastic–plastic transition and no slip indeterminacy. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, *55*, 278-288. https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2015.08.012

Franciosi, P., Berveiller, M., & Zaoui, A. (1979). Latent Hardening in FCC Crystals. In P. Haasen, V. Gerold, & G. Kostorz (Éds.), *Strength of Metals and Alloys* (p. 23-28). Pergamon. https://doi.org/10.1016/B978-1-4832-8412-5.50012-6

Franciosi, P., Le, L. T., Monnet, G., Kahloun, C., & Chavanne, M.-H. (2015). Investigation of slip system activity in iron at room temperature by SEM and AFM in-situ tensile and compression tests of iron single crystals. *International Journal of Plasticity*, *65*, 226-249. https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2014.09.008

Gao, H., & Huang, Y. (2003). Geometrically necessary dislocation and size-dependent plasticity. *Scripta Materialia*, *48*(2), 113-118. https://doi.org/10.1016/S1359-6462(02)00329-9

Gélébart, L. (s. d.). *AMITEX_FFTP*. Consulté 5 septembre 2024, à l'adresse https://amitexfftp.github.io/AMITEX/index.html

Gélébart, L. (2021). Grain size effects and weakest link theory in 3D crystal plasticity simulations of polycrystals. *Comptes Rendus. Physique*, *22*(S3), 313-330. https://doi.org/10.5802/crphys.53

Gélébart, L., & Ouaki, F. (2015). Filtering material properties to improve FFT-based methods for numerical homogenization. *Journal of Computational Physics*, *294*, 90-95. https://doi.org/10.1016/j.jcp.2015.03.048

Geraci, A., La Rosa, G., & Risitano, A. (1992). On the new methodology for the determination of the fatigue limit of materials using thermal infrared techniques. In *Risk minimization by experimental mechanics* (p. 183-190).

Gilbert, E. N. (1962). Random Subdivisions of Space into Crystals. *The Annals of Mathematical Statistics*, *33*(3), 958-972.

Gironès, A., Villechaise, P., Mateo, A., Anglada, M., & Méndez, J. (2004). EBSD studies on the influence of texture on the surface damage mechanisms developed in cyclically loaded aged duplex stainless steels. *Materials Science and Engineering: A, 13th International*

Conference on the Strength of Materials, *387-389*, 516-521. https://doi.org/10.1016/j.msea.2004.01.105

Groeber, M. A., & Jackson, M. A. (2014). DREAM.3D : A Digital Representation Environment for the Analysis of Microstructure in 3D. *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*, *3*(1), 56-72. https://doi.org/10.1186/2193-9772-3-5

Grosskreutz, J. C. (1971). The mechanisms of metal fatigue (I). *Physica Status Solidi (b)*, *47*(1), 11-31. https://doi.org/10.1002/pssb.2220470102

Gu, T., Stopka, K. S., Xu, C., & McDowell, D. L. (2023). Modeling the statistical distribution of fatigue crack formation lifetime in large volumes of polycrystalline microstructures. *Acta Materialia*, *247*, 118715. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2023.118715

Guellec, C. (2023). *Caractérisation en fatigue à grand nombre de cycles par mesures d'auto-échauffement des aciers d'arbres de transmission pour application navale sous chargements cycliques complexes* [These de doctorat, Brest, École nationale supérieure de techniques avancées Bretagne]. https://theses.fr/2023ENTA0001

Guerchais, R., Robert, C., Morel, F., & Saintier, N. (2014). Micromechanical study of the loading path effect in high cycle fatigue. *International Journal of Fatigue*, *59*, 64-75. https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2013.09.014

Harren, S. V., Dève, H. E., & Asaro, R. J. (1988). Shear band formation in plane strain compression. *Acta Metallurgica*, *36*(9), 2435-2480. https://doi.org/10.1016/0001-6160(88)90193-9

Hennessey, C., Castelluccio, G. M., & McDowell, D. L. (2017). Sensitivity of polycrystal plasticity to slip system kinematic hardening laws for Al 7075-T6. *Materials Science and Engineering: A*, *687*, 241-248. https://doi.org/10.1016/j.msea.2017.01.070

Hild, F., Billardon, R., & Marquis, D. (1992). Heterogeneity of stresses and rupture of brittle materials. *Academie des Sciences Paris Comptes Rendus Serie Sciences Mathematiques*, *315*, 1293-1298.

Hor, A., Saintier, N., Robert, C., Palin-Luc, T., & Morel, F. (2014). Statistical assessment of multiaxial HCF criteria at the grain scale. *International Journal of Fatigue, Multiaxial Fatigue 2013*, *67*, 151-158. https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2014.01.024

Jackson, A. G. (1991). Slip Systems. In A. G. Jackson (Éd.), *Handbook of Crystallography : For Electron Microscopists and Others* (p. 83-88). Springer. https://doi.org/10.1007/978-1-4612-3052-6_7

Jaske, C. E., Payer, J. H., & Balint, V. S. (1981). *Corrosion Fatigue of Metals in Marine Environments* (MCIC8142). Art. MCIC8142. https://apps.dtic.mil/sti/html/tr/ADA107247/

Jeulin, D. (1991). *Modeles morphologiques de structures aleatoires et de changement d'echelle* [Thesis, Caen]. https://theses.fr/1991CAEN2016

Jia, Z., Pastor, M.-L., Garnier, C., & Gong, X. (2023). A new method for determination of fatigue limit of composite laminates based on thermographic data. *International Journal of Fatigue*, *168*, 107445. https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2022.107445

Kabel, M., Böhlke, T., & Schneider, M. (2014). Efficient fixed point and Newton–Krylov solvers for FFT-based homogenization of elasticity at large deformations. *Computational Mechanics*, *54*(6), 1497-1514. https://doi.org/10.1007/s00466-014-1071-8

Khan, A. S., Kazmi, R., Pandey, A., & Stoughton, T. (2009). Evolution of subsequent yield surfaces and elastic constants with finite plastic deformation. Part-I : A very low work hardening aluminum alloy (Al6061-T6511). *International Journal of Plasticity, Exploring New Horizons of Metal Forming Research*, *25*(9), 1611-1625. https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2008.07.003

Kim, S. A., & Johnson, W. L. (2007). Elastic constants and internal friction of martensitic steel, ferritic-pearlitic steel, and α-iron. *Materials Science and Engineering: A*, *452-453*, 633-639. https://doi.org/10.1016/j.msea.2006.11.147

Kordatos, E. Z., Dassios, K. G., Aggelis, D. G., & Matikas, T. E. (2013). Rapid evaluation of the fatigue limit in composites using infrared lock-in thermography and acoustic emission. *Mechanics Research Communications*, *54*, 14-20. https://doi.org/10.1016/j.mechrescom.2013.09.005

Korsunsky, A., Dini, D., Dunne, F., & Walsh, M. (2007). Comparative assessment of dissipated energy and other fatigue criteria☆. *International Journal of Fatigue*, *29*(9-11), 1990-1995. https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2007.01.007

Krapez, J., Pacou, D., & Gardette, G. (2000). Lock-in thermography and fatigue limit of metals. *OFFICE NATIONAL D ETUDES ET DE RECHERCHES AEROSPATIALES ONERA-PUBLICATIONS-TP*, (187).

Kröner, E. (1958). Berechnung der elastischen Konstanten des Vielkristalls aus den Konstanten des Einkristalls. *Zeitschrift für Physik*, *151*(4), 504-518. https://doi.org/10.1007/BF01337948

Kwiatkowski, V., Le Saux, M., Le Saux, V., Leclercq, S., & Marco, Y. (2023). Fatigue of short carbon fiber reinforced PEEK under compression : Influence of the load ratio and predictions from heat buildup measurements. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, *46*(7), 2396-2410. https://doi.org/10.1111/ffe.14003

La Rosa, G., & Risitano, A. (2000). Thermographic methodology for rapid determination of the fatigue limit of materials and mechanical components. *International Journal of Fatigue*, *22*(1), 65-73. https://doi.org/10.1016/S0142-1123(99)00088-2

Lahellec, N., Michel, J.-C., Moulinec, H., & Suquet, P. (2003). Analysis of inhomogeneous materials at large strains using fast Fourier transforms. *IUTAM Symposium on Computational Mechanics of Solid Materials at Large Strains: Proceedings of the IUTAM Symposium held in Stuttgart, Germany, 20–24 August 2001*, 247-258.

Lautensack, C., & Zuyev, S. (2008). Random Laguerre tessellations. *Advances in Applied Probability*, *40*(3), 630-650. https://doi.org/10.1239/aap/1222868179

Le Saux, V., Marco, Y., Calloch, S., Doudard, C., & Charrier, P. (2010). Fast evaluation of the fatigue lifetime of rubber-like materials based on a heat build-up protocol and micro-tomography measurements. *International Journal of Fatigue*, *32*(10), 1582-1590. https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2010.02.014

Lebensohn, R. A., & Cazacu, O. (2012). Effect of single-crystal plastic deformation mechanisms on the dilatational plastic response of porous polycrystals. *International Journal of Solids and Structures*, *49*(26), 3838-3852. https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2012.08.019

Lehr, E. (1926). Die Dauerfestigkeit, ihre Bedeutung für die Praxis und ihre kurzfristige Ermittlung mittels neuartiger Prüfmaschinen. *Glasers Ann. Gew*, *99*, 109-114.

Lemaitre, J., & Chaboche, J.-L. (1994). *Mechanics of Solid Materials*. Cambridge University Press.

Lepitre, P. (2024). *Étude de l'influence de l'intégrité de surface et d'un revêtement sur les propriétés en fatigue à grand nombre de cycles de l'acier 300M par mesures thermométriques sous chargement cycliques* [Phdthesis, École Nationale Supérieure de Techniques Avancées Bretagne]. https://theses.hal.science/tel-05050891

Lepitre, P., Calloch, S., Doudard, C., Dhondt, M., & Surand, M. (2022). Influence of Surface Integrity and Coating on the High Cycle Fatigue Properties of 300M Steel from Self-Heating Tests under Cyclic Loads. *Procedia CIRP, 6th CIRP Conference on Surface Integrity*, *108*, 37-42. https://doi.org/10.1016/j.procir.2022.03.012

Li, B., Chen, C., Qin, Z., & Xue, H. (2023). An energy-CP-combined model for predicting the fatigue life of polycrystalline materials under high cycle and very high cycle fatigue. *Engineering Fracture Mechanics*, *291*, 109564. https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2023.109564

Li, Q., Zhang, H., Chen, F., Xu, D., Sui, D., & Cui, Z. (2020). Study on the plastic anisotropy of advanced high strength steel sheet : Experiments and microstructure-based crystal plasticity modeling. *International Journal of Mechanical Sciences*, *176*, 105569. https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2020.105569

Li, Y., Zhan, M., Jiang, X., Lei, Y., & Gao, P. (2023). Low-cycle fatigue behavior and life prediction of TA15 titanium alloy by crystal plasticity-based modelling. *Journal of Materials Research and Technology*, *23*, 954-966. https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2023.01.063

Lippmann, B., & Schwinger, J. (1950). Variational Principles for Scattering Processes .1. *Physical Review*, *79*(3), 469-480. https://doi.org/10.1103/PhysRev.79.469

Louge, J. (2019). *Apports des mesures d'auto-échauffement pour l'étude de la fatigue des aciers : Effets d'histoire et cisaillement pur* [Phdthesis, École Nationale Supérieure de Techniques Avancées Bretagne]. https://theses.hal.science/tel-02271001

Louge, J., Moyne, S., Doudard, C., Calloch, S., Weber, B., & Munier, R. (2022). Self-heating measurements under cyclic loading to identify history effects on HCF properties of high-strength low-alloy steel : Part II—Modeling. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, *45*(12), 3524-3534. https://doi.org/10.1111/ffe.13827

Lu, J., Sun, W., & Becker, A. (2016). Material characterisation and finite element modelling of cyclic plasticity behaviour for 304 stainless steel using a crystal plasticity model. *International Journal of Mechanical Sciences*, *105*, 315-329. https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2015.11.024

Lucarini, S., Dunne, F. P. E., & Martínez-Pañeda, E. (2023). An FFT-based crystal plasticity phase-field model for micromechanical fatigue cracking based on the stored energy density. *International Journal of Fatigue*, *172*, 107670. https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2023.107670

Luong, M. P. (1998). Fatigue limit evaluation of metals using an infrared thermographic technique. *Mechanics of Materials*, *28*(1), 155-163. https://doi.org/10.1016/S0167-6636(97)00047-1

Luong, P. (2000). *The right tension of strings*. 48-50.

Ma, B.-T., & Laird, C. (1989). Overview of fatigue behavior in copper single crystals- II. Population, size distribution and growth kinetics of stage I cracks for tests at constant strain amplitude. *Acta metall.*, *37*(2), 337-348.

Mandel, J. (1971). Plasticite classique et viscoplasticite. *CISM Lectures Notes*.

Manonukul, A., & Dunne, F. P. E. (2004). High– and low–cycle fatigue crack initiation using polycrystal plasticity. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, *460*(2047), 1881-1903. https://doi.org/10.1098/rspa.2003.1258

Marano, A., & Gélébart, L. (2020). Non-linear composite voxels for FFT-based explicit modeling of slip bands : Application to basal channeling in irradiated Zr alloys. *International Journal of Solids and Structures*, *198*, 110-125. https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2020.04.027

Marano, A., Gélébart, L., & Forest, S. (2019). Intragranular localization induced by softening crystal plasticity : Analysis of slip and kink bands localization modes from high resolution FFT-simulations results. *Acta Materialia*, *175*, 262-275. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.06.010

McCLUNG, R. C. (2007). A literature survey on the stability and significance of residual stresses during fatigue. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, *30*(3), 173-205. https://doi.org/10.1111/j.1460-2695.2007.01102.x

McDowell, D. L. (1995). Stress state dependence of cyclic ratchetting behavior of two rail steels. *International Journal of Plasticity*, *11*(4), 397-421. https://doi.org/10.1016/S0749-6419(95)00005-4

McDowell, D. L. (2007). Simulation-based strategies for microstructure-sensitive fatigue modeling. *Materials Science and Engineering: A, The McEvily Symposium: Fatigue and Fracture of Traditional and Advanced Materials, TMS 2006*, *468-470*, 4-14. https://doi.org/10.1016/j.msea.2006.08.129

McDowell, D. L., & Dunne, F. P. E. (2010). Microstructure-sensitive computational modeling of fatigue crack formation. *International Journal of Fatigue, Emerging Frontiers in Fatigue*, *32*(9), 1521-1542. https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2010.01.003

Méric, L., Cailletaud, G., & Gaspérini, M. (1994). F.E. calculations of copper bicrystal specimens submitted to tension-compression tests. *Acta Metallurgica et Materialia*, *42*(3), 921-935. https://doi.org/10.1016/0956-7151(94)90287-9

Méric, L., Poubanne, P., & Cailletaud, G. (1991). Single Crystal Modeling for Structural Calculations : Part 1—Model Presentation. *Journal of Engineering Materials and Technology*, *113*(1), 162-170. https://doi.org/10.1115/1.2903374

Miehe, C., Schröder, J., & Schotte, J. (1999). Computational homogenization analysis in finite plasticity Simulation of texture development in polycrystalline materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, *171*(3), 387-418. https://doi.org/10.1016/S0045-7825(98)00218-7

Mika, D. P., & Dawson, P. R. (1998). Effects of grain interaction on deformation in polycrystals. *Materials Science and Engineering: A*, *257*(1), 62-76. https://doi.org/10.1016/S0921-5093(98)00824-7

Mion, A., Doudard, C., Mauget, F., Cormier, J., Roué, V., Zouari, A., & Calloch, S. (2025). Self-heating measurements at high temperature under high frequency cyclic loading. *International Journal of Mechanical Sciences*, *299*, 110353. https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2025.110353

Molinari, A., Canova, G. R., & Ahzi, S. (1987). A self consistent approach of the large deformation polycrystal viscoplasticity. *Acta Metallurgica*, *35*(12), 2983-2994. https://doi.org/10.1016/0001-6160(87)90297-5

Moore, H. F., & Kommers, J. B. (1921). Fatigue of metals under repeated stress. *Chemical and Metallurgical Engineering*, *25*, 1141-1144.

Moulinec, H., & Suquet, P. (1994). A fast numerical method for computing the linear and nonlinear mechanical properties of composites. *Comptes Rendus de l'Académie des sciences*, *II*(318), 1417-1423.

Mughrabi, H. (2009). Cyclic Slip Irreversibilities and the Evolution of Fatigue Damage. *Metallurgical and Materials Transactions B*, *40*(4), 431-453. https://doi.org/10.1007/s11663-009-9240-4

Munier, R. (2012). *Etude de la fatigue des aciers laminés à partir de l'auto-échauffement sous sollicitation cyclique : Essais, observations, modélisation et influence d'une pré-déformation plastique* [Phdthesis, Université de Bretagne occidentale - Brest]. https://theses.hal.science/tel-00717932

Munier, R., Doudard, C., Calloch, S., & Weber, B. (2014). Determination of high cycle fatigue properties of a wide range of steel sheet grades from self-heating measurements. *International Journal of Fatigue*, *63*, 46-61. https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2014.01.004

Munier, R., Doudard, C., Calloch, S., & Weber, B. (2017). Identification of the micro-plasticity mechanisms at the origin of self-heating under cyclic loading with low stress amplitude. *International Journal of Fatigue*, *103*, 122-135. https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2017.05.027

Murakami, Y. (2019). *Metal fatigue : Effects of small defects and nonmetallic inclusions*. Academic Press.

Najd, J., Harizi, W., Aboura, Z., Zappino, E., & Carrera, E. (2022). Rapid estimation of the fatigue limit of Smart Polymer-Matrix Composites (PMC) using the self-heating tests.

Composite Structures, *282*, 115039. https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2021.115039

Neumann, P. (1987). Plastic Processes at Crack Tips. In R. M. Latanision & R. H. Jones (Éds.), *Chemistry and Physics of Fracture* (p. 63-84). Springer Netherlands. https://doi.org/10.1007/978-94-009-3665-2_5

Ohno, N., & Wang, J.-D. (1993). Kinematic hardening rules with critical state of dynamic recovery, part I : Formulation and basic features for ratchetting behavior. *International Journal of Plasticity*, *9*(3), 375-390. https://doi.org/10.1016/0749-6419(93)90042-O

Patra, A., & McDowell, D. L. (2016). Crystal plasticity investigation of the microstructural factors influencing dislocation channeling in a model irradiated bcc material. *Acta Materialia*, *110*, 364-376. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.03.041

Peirce, D., Asaro, R. J., & Needleman, A. (1982). An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals. *Acta Metallurgica*, *30*(6), 1087-1119. https://doi.org/10.1016/0001-6160(82)90005-0

Peirce, D., Asaro, R. J., & Needleman, A. (1983). Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids. *Acta Metallurgica*, *31*(12), 1951-1976. https://doi.org/10.1016/0001-6160(83)90014-7

Pilvin, P. (1990). *Approches multiechelles pour la prévison du comportement anélastique des métaux* [PhD Thesis]. Paris 6.

Pilvin, P. (1998). Une approche simplifiée pour schématiser l'effet de surface sur le comportement mécanique d'un polycristal. *Le Journal de Physique IV*, *08*(PR4), Pr4-38. https://doi.org/10.1051/jp4:1998404

Polák, J. (2023). Role of Persistent Slip Bands and Persistent Slip Markings in Fatigue Crack Initiation in Polycrystals. *Crystals*, *13*(2), Art. 2. https://doi.org/10.3390/cryst13020220

Poncelet, M., Doudard, C., Calloch, S., Hild, F., Weber, B., & Galtier, A. (2007). Prediction of self-heating measurements under proportional and non-proportional multiaxial cyclic loadings. *Comptes Rendus. Mécanique*, *335*(2), 81-86. https://doi.org/10.1016/j.crme.2007.01.002

Poncelet, M., Doudard, C., Calloch, S., Weber, B., & Hild, F. (2010). Probabilistic multiscale models and measurements of self-heating under multiaxial high cycle fatigue. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, *58*(4), 578-593. https://doi.org/10.1016/j.jmps.2010.01.003

Prager, W. (1956). A New Method of Analyzing Stresses and Strains in Work-Hardening Plastic Solids. *Journal of Applied Mechanics*, *23*(4), 493-496. https://doi.org/10.1115/1.4011389

Prokhorov, A., Vshivkov, A., Plekhov, O., Kashaev, N., Fomin, F., Ozerov, M., & Zherebtsov, S. (2021). The Effect of LSP on the Structure Evolution and Self-Heating of ARMCO Iron under Cyclic Loading. *Metals*, *11*(8), 1198. https://doi.org/10.3390/met11081198

Przybyla, C. P., Musinski, W. D., Castelluccio, G. M., & McDowell, D. L. (2013). Microstructure-sensitive HCF and VHCF simulations. *International Journal of Fatigue, Fatigue and*

Microstructure: A special issue on recent advances, *57*, 9-27. https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2012.09.014

Quey, R., Dawson, P. R., & Barbe, F. (2011). Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method : Generation, meshing and remeshing. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, *200*(17), 1729-1745. https://doi.org/10.1016/j.cma.2011.01.002

Quey, R., Villani, A., & Maurice, C. (2018). Nearly uniform sampling of crystal orientations. *Journal of Applied Crystallography*, *51*(4), 1162-1173. https://doi.org/10.1107/S1600576718009019

Raabe, D., & Roters, F. (2004). Using texture components in crystal plasticity finite element simulations. *International Journal of Plasticity, Owen Richmond Memorial Special Issue*, *20*(3), 339-361. https://doi.org/10.1016/S0749-6419(03)00092-5

Robert, C., Saintier, N., Palin-Luc, T., & Morel, F. (2012). Micro-mechanical modelling of high cycle fatigue behaviour of metals under multiaxial loads. *Mechanics of Materials*, *55*, 112-129. https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2012.08.006

Rogne, B., & Thaulow, C. (2014). Strengthening mechanisms of iron micropillars. *Philosophical Magazine*, *95*, 1-15. https://doi.org/10.1080/14786435.2014.984004

Roters, F., Diehl, M., Shanthraj, P., Eisenlohr, P., Reuber, C., Wong, S. L., Maiti, T., Ebrahimi, A., Hochrainer, T., Fabritius, H.-O., Nikolov, S., Friák, M., Fujita, N., Grilli, N., Janssens, K. G. F., Jia, N., Kok, P. J. J., Ma, D., Meier, F., … Raabe, D. (2019). DAMASK – The Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit for modeling multi-physics crystal plasticity, thermal, and damage phenomena from the single crystal up to the component scale. *Computational Materials Science*, *158*, 420-478. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.04.030

Sachs, G. (1928). Plasticity problems in metals. *Transactions of the Faraday Society*, *24*, 84-92.

Sachtleber, M., Zhao, Z., & Raabe, D. (2002). Experimental investigation of plastic grain interaction. *Materials Science and Engineering: A*, *336*(1), 81-87. https://doi.org/10.1016/S0921-5093(01)01974-8

Sangid, M. D. (2013). The physics of fatigue crack initiation. *International Journal of Fatigue, Fatigue and Microstructure: A special issue on recent advances*, *57*, 58-72. https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2012.10.009

Sarma, G. B., & Dawson, P. R. (1996). Texture predictions using a polycrystal plasticity model incorporating neighbor interactions. *International Journal of Plasticity*, *12*(8), 1023-1054. https://doi.org/10.1016/S0749-6419(96)00040-X

Schäfer, B. J., Song, X., Sonnweber-Ribic, P., ul Hassan, H., & Hartmaier, A. (2019). Micromechanical Modelling of the Cyclic Deformation Behavior of Martensitic SAE 4150—A Comparison of Different Kinematic Hardening Models. *Metals*, *9*(3), Art. 3. https://doi.org/10.3390/met9030368

Schijve, J. (2003). Fatigue of structures and materials in the 20th century and the state of the art. *International Journal of Fatigue*, *25*(8), 679-702. https://doi.org/10.1016/S0142-1123(03)00051-3

Sévédé, T. (2025). *Étude et modélisation des propriétés en fatigue à très grand nombre de cycles à partir de mesures d'auto-échauffement sous sollicitation cyclique* [Thesis, Palaiseau, École nationale supérieure de techniques avancées]. https://theses.fr/2025ESTA0001

Sévédé, T., Younes, D., Shabnam, A. C., & Sylvain, C. (2024). Self-heating test under cyclic loading at 20kHz : Determination of the heat source field. *Procedia Structural Integrity, Fatigue Design 2023 (FatDes 2023)*, *57*, 335-342. https://doi.org/10.1016/j.prostr.2024.03.036

Stanzl-Tschegg, S. (2014). Very high cycle fatigue measuring techniques. *International Journal of Fatigue, New Advances in VHCF*, *60*, 2-17. https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2012.11.016

Stinville, J. C., Hestroffer, J. M., Charpagne, M. A., Polonsky, A. T., Echlin, M. P., Torbet, C. J., Valle, V., Nygren, K. E., Miller, M. P., Klaas, O., Loghin, A., Beyerlein, I. J., & Pollock, T. M. (2022). Multi-modal Dataset of a Polycrystalline Metallic Material : 3D Microstructure and Deformation Fields. *Scientific Data*, *9*(1), 460. https://doi.org/10.1038/s41597-022-01525-w

Stopka, K. S., Yaghoobi, M., Allison, J. E., & McDowell, D. L. (2021). Effects of Boundary Conditions on Microstructure-Sensitive Fatigue Crystal Plasticity Analysis. *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*, *10*(3), 393-412. https://doi.org/10.1007/s40192-021-00219-2

Stopka, K. S., Yaghoobi, M., Allison, J. E., & McDowell, D. L. (2022). Simulated effects of sample size and grain neighborhood on the modeling of extreme value fatigue response. *Acta Materialia*, *224*, 117524. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.117524

Stromeyer, C. E. (1914). The determination of fatigue limits under alternating stress conditions. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, *90*(620), 411-425. https://doi.org/10.1098/rspa.1914.0066

Suresh, S. (1998). *Fatigue of Materials*. Cambridge University Press.

Sweeney, C. A., Vorster, W., Leen, S. B., Sakurada, E., McHugh, P. E., & Dunne, F. P. E. (2013). The role of elastic anisotropy, length scale and crystallographic slip in fatigue crack nucleation. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, *61*(5), 1224-1240. https://doi.org/10.1016/j.jmps.2013.01.001

Tanaka, K., & Mura, T. (1981). A Dislocation Model for Fatigue Crack Initiation. *Journal of Applied Mechanics*, *48*(1), 97-103. https://doi.org/10.1115/1.3157599

Taylor, G. I. (1938). Analysis of plastic strain in a cubic crystal. *Stephen Timoshenko 60th anniversary volume*, 218-224.

To, Q.-D., & Bonnet, G. (2020). FFT based numerical homogenization method for porous conductive materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, *368*, 113160. https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113160

Tóth, L. S., & Van Houtte, P. (1992). Discretization Techniques for Orientation Distribution Functions. *Texture, Stress, and Microstructure*, *19*(4), 972830. https://doi.org/10.1155/TSM.19.229

Webster, G. A., & Ezeilo, A. N. (2001). Residual stress distributions and their influence on fatigue lifetimes. *International Journal of Fatigue*, *23*, 375-383. https://doi.org/10.1016/S0142-1123(01)00133-5

Weibull, W. (1951). A statistical distribution function of wide applicability. *Journal of applied mechanics*.

Welter, G. (1937). Essais d'endurance par traction et compression. *Wlad. Inst. Met*, *32*.

Withers, P. J. (2007). Residual stress and its role in failure. *Reports on Progress in Physics*, *70*(12), 2211. https://doi.org/10.1088/0034-4885/70/12/R04

Wöhler, A. (1870). *Über die Festigkeitsversuche mit Eisen und Stahl*. Ernst & Korn.

Xie, C. L., & Nakamachi, E. (2002). Investigations of the formability of BCC steel sheets by using crystalline plasticity finite element analysis. *Materials & Design*, *23*(1), 59-68. https://doi.org/10.1016/S0261-3069(01)00043-7

Yaghoobi, M., Stopka, K. S., Lakshmanan, A., Sundararaghavan, V., Allison, J. E., & McDowell, D. L. (2021). PRISMS-Fatigue computational framework for fatigue analysis in polycrystalline metals and alloys. *Npj Computational Materials*, *7*(1), 1-12. https://doi.org/10.1038/s41524-021-00506-8

Yuan, G.-J., Zhang, X.-C., Chen, B., Tu, S.-T., & Zhang, C.-C. (2020). Low-cycle fatigue life prediction of a polycrystalline nickel-base superalloy using crystal plasticity modelling approach. *Journal of Materials Science & Technology*, *38*, 28-38. https://doi.org/10.1016/j.jmst.2019.05.072

Zener, C. (1947). Contributions to the theory of beta-phase alloys. *Physical Review*, *71*(12), 846-851. Scopus. https://doi.org/10.1103/PhysRev.71.846

Titre : Apports des simulations par la méthode FFT sur des agrégats polycristallins à l'étude de la dissipation des métaux sous sollicitations cycliques de faible amplitude

Mots clés : plasticité cristalline, agrégat polycristallin, dissipation, méthode FFT, fatigue à grand nombre de cycles (HCF), paramètre indicateur de fatigue (FIP)

Résumé : Analyse de la dissipation sous chargement cyclique, communément appelée mesures d'auto-échauffement, est une méthode expérimentale de plus en plus utilisée pour estimer les propriétés de fatigue à grand nombre de cycles. Le développement de modèles reliant les mesures d'auto-échauffement aux propriétés de fatigue est essentiel pour exploiter pleinement les avantages de cette technique expérimentale. Ce travail propose l'utilisation d'une méthode basée sur la transformée de Fourier rapide (FFT) appliquée à un volume représentatif d'un agrégat polycristallin afin d'analyser l'évolution de la dissipation lors de chargements cycliques de faible amplitude. Cette approche vise à reproduire qualitativement et quantitativement les courbes d'auto-échauffement à partir de l'évolution de la dissipation cyclique moyenne par cycle en fonction de l'amplitude de chargement. Dans cette étude, des chargements cycliques uniaxiaux avec un rapport de charge R=−1 sont considérés. Une attention particulière est portée à l'étude de l'apparition hétérogène des phénomènes de micro-plasticité dans les agrégats, à l'origine de la dissipation (c'est-à-dire une plasticité localisée dans seulement quelques bandes de glissement). Un dialogue avec des approches moins fines, telles que celles utilisant des processus ponctuels de Poisson (P.P.P.), peut alors être établi afin de décrire l'apparition progressive et localisée de ces mécanismes. Les résultats obtenus sont en bon accord avec les résultats expérimentaux rapportés dans la littérature. Enfin, un paramètre indicateur de fatigue (FIP) basé sur le glissement cumulé est proposé ; la dispersion en fatigue associée suggère un lien possible entre l'activation des bandes de glissement, les mesures d'auto-échauffement et la dispersion des résultats d'essais de fatigue à grand nombre de cycles.

Title: Contributions of FFT-based simulations on polycrystalline aggregates to the study of metal dissipation under low-amplitude cyclic loading

Keywords: crystal plasticity, polycrystalline aggregate, dissipation, FFT method, high-cycle fatigue (HCF), Fatigue indicator parameter (FIP)

Abstract: Dissipation analysis under cyclic loading, commonly referred to as self-heating measurements, is an increasingly popular experimental method for estimating high-cycle fatigue (HCF) properties. The development of models linking self-heating measurements to fatigue properties is essential for exploiting the advantages of this experimental technique. This work proposes the use of a fast Fourier transform-based method (FFT) on a representative volume element of a polycrystalline aggregate to analyze the evolution of dissipation during low-amplitude cyclic loading. This approach aims to qualitatively and quantitatively recover self-heating curves based on the evolution of the mean steady-state cyclic dissipation with the loading amplitude. In this study, uniaxial cyclic loadings with a load ratio of R = -1 are examined. Particular attention is paid to the study of the heterogeneous appearance of micro-plasticity phenomena in aggregates at the origin of dissipation (i.e., localized plasticity in just a few slip bands). A dialog with less fine-grained approaches, such as those using Poisson point processes (P.P.P), can then be established to describe the progressive and localized appearance of these mechanisms. The obtained results are in good agreement with the experimental results reported in the literature. Finally, a fatigue indicator parameter (FIP) based on cumulated slip is proposed; the associated fatigue scatter suggests a possible link between scenario of slip-band activation, self-heating measurements and scatter of HCF testing results.